内 容 简 介

粒子同固体相互作用物理学是一门介于核物理与固体物理之间的交叉学科．本书讨论了这一学科的基本理论、实验方法和在科学技术中的应用．作者试图将三者有机地结合起来，系统地进行阐述，并用适当的篇幅详细介绍了实验方法和技术应用的新近发展．

本书可供原子核物理和核技术、固体物理和材料科学等方面从事研究、教学和应用的科技人员及大专院校有关专业师生参考．

实验物理学丛书

粒子同固体相互作用物理学

上 册

王广厚 著

责任编辑 荣镇敏 姚为克

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1988年7月第一版 开本：850×1168 1/32

1988年7月第一次印刷 印张：19 7/8

印数：精 1—740 插页：精 2

平 1—1,800 字数：520,000

ISBN 7-03-000327-6/O · 88

定价：布面精装：9.80元

平 装：8.30元

科技新书目：168-平081 精082

内 容 简 介

粒子同固体相互作用物理学是一门介于核物理和固体物理之间的交叉学科．本书系统地讨论了这一学科的基本理论、实验方法和在科学技术中的应用，作者试图将三者有机地结合起来，连贯地进行阐述，并用适当的篇幅详细介绍实验方法和技术应用的最新发展．

下册主要阐述离子注入和离子束混合概念，辐照损伤以及沟道辐射．

实验物理学丛书

粒子同固体相互作用物理学

下 册

王广厚 著

责任编辑 赵惠芝

科学出版社出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码：100707

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1991年2月第一版 开本：850×1168 1/32

1991年2月第一次印刷 印张：17 1/2

印数：平1—600 插页：精2

精1—470 字数：462 000

ISBN 7-03-001209-7/O·267（平）

ISBN 7-03-001210-0/O·268（精）

定价：平 装：20.90 元

布面精装：23.10 元

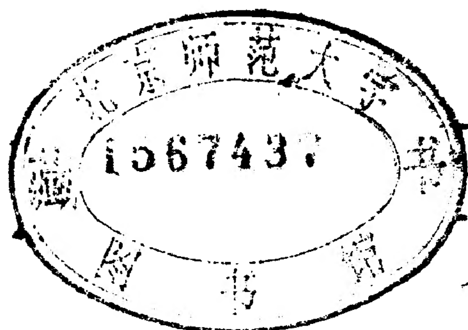
科技新书目：234-平 100 精 101

实验物理学丛书

粒子同固体相互作用物理学

下册

王广厚 著



科学出版社

1991

序 言

实验是物理学发展的基础，又是检验物理理论的唯一标准．回顾物理学发展的历史，正是实验技术的发展，推动着整个物理学向前发展．因此，实验是物理学和一切科学技术发展的基础．

为了适应我国科技事业发展的需要，强调实验物理学的重要性，并总结我国物理学工作者在实验工作中的创新和实践经验，我们特编辑出版《实验物理学丛书》．

本丛书的编辑方针是：1.密切联系当前科研、教学、生产的实际需要，介绍各种物理实验的基本原理、技术、设备及其在各方面的应用．2.反映国内外最新的实验水平和发展动向，并注意实用性．3.以科技工作者和高等院校师生为对象，坚持理论联系实际，贯彻百家争鸣的方针，力求使丛书具有我国的特色和风格．

我国科技事业的发展已进入一个新的时期，实现科学技术现代化是我国广大科技工作者肩负的光荣而艰巨的任务．我们诚恳地希望广大物理学工作者发挥为社会主义事业著述的积极性，不断总结实践经验，总结研究成果，积极支持丛书的出版工作，共同为出好该丛书而努力．

《实验物理学丛书》编委会

《实验物理学丛书》编委会

序

70 多年前，著名物理学家卢瑟福及其合作者利用 α 粒子轰击金箔，观测到背散射的现象，从而证实了原子核的存在，并建立了原子的有核结构模型，为微观世界的研究揭开了序幕．随后 Cockroft 与 Walton 首先制成了高压倍加器，开创了人工方法加速带电粒子的新纪元．从此，各种类型的粒子加速器相继问世，成为研究微观世界的主要实验手段．时至今日，加速器愈造愈大．继卢瑟福以后，高能物理学家们采用更高能量的粒子束来轰击靶材，或与另一粒子束相撞，从粒子束的散射研究中来索取有关基本粒子结构的信息．这反映了问题的一个方面，即基础研究愈来愈深入到微观世界更细微的层次．但另一方面，昔日的基础研究有些已转化成应用研究，例如：原始的卢瑟福背散射技术已成为表征固体材料的一种标准方法，可用以测定杂质原子在半导体中的分布；而应用高压倍加器及其它低能加速器发展起来的离子注入技术也在半导体的掺杂与材料改性方面获得了大量的应用，对于国民经济建设具有显著的效益；目前绝大多数的低能加速器的研究重点已从核物理本身转移到固体物理、材料科学以及化学、生物等应用领域．通过核物理学家和其它学科的科学家的共同努力，开创了一门介于核物理与固体物理之间的新兴交叉学科——带电粒子与固体的相互作用．由此衍生的各种技术在材料科学中的应用，亦正方兴未艾．我国有许多单位已开展了这一领域中的研究和开发工作．因此，不论是人才的培养或技术的开拓，都迫切需要一本专著或教科书，深入浅出地叙述有关的基本理论，并对整个领域发展现状给予适当的介绍．

王广厚同志于 1980—1982 曾在美国纽约州立大学奥尔巴尼分校物理系进修，进行了一系列有关粒子与固体相互作用的研究

工作，接触到这一领域中的某些前沿课题；他回国之后在南京大学物理系继续这方面的工作，并且为研究生开出了“粒子与固体相互作用物理学”这门课程．鉴于国内外尚无合适的教材或专著可以依循，他就致力于广泛收集资料，掌握、消化有关的基础理论，融会贯通大量素材，在教学讲义的基础上，扩充改写成本书．在写作之中博采各家之所长：一方面借鉴于丹麦学派严谨明晰的理论体系，用物理学的线索将全书贯穿起来，便于读者理解和掌握；另一方面注意吸取美国学派着重应用的特色，因此用适当的篇幅详细介绍了实验方法和技术上应用的新近进展，以备从事实际工作的同志参考．作者在本书写作中力图将基础理论、实验方法和科学技术中的应用三者有机地结合起来，连贯地进行阐述．这种尝试，肯定会得到具有不同学科背景的读者们的欢迎．

冯　端

南京大学固体物理研究所

前　　言

带电粒子同物质相互作用的研究为近代物理学奠定了基础，人们对微观世界层次——原子核、基本粒子——的认识也以此为开端.近代物理学上许多重大的成就，都是从研究带电粒子的行为获得的. 早在 20 世纪初，卢瑟福用 α 粒子对金属箔片的散射实验证实了原子核的存在，揭开了原子世界的奥秘. 随着带电粒子加速器的建成，可以人工地产生带电粒子束，人们研究微观世界物质结构的手段更加强有力了. 在向物质世界更深层次——基本粒子结构进军的同时，原子核物理学家同其它领域的科学家们结合起来，利用核物理及小型粒子加速器这一工具，向原子分子物理、固体物理以及化学、生物学和医学等方面渗透与发展. 这不仅大大促进了这些学科的发展和进化，形成了一些生命力很强的交叉学科，而且把由实验核物理发展起来的现代科学技术直接为人类生产和生活服务，进一步推动着科学革命和技术革命. 例如，被称作三束技术的离子束、电子束和光子束，推动了半导体器件和集成电路的高速发展，使半导体生产进人到超大规模集成电路的新时代. 离子束分析方法是特有的高灵敏度和高效率微探针技术，这一方法已广泛应用于各个科学技术领域. 带电粒子同固体相互作用物理学就是一门原子核物理和固态物理相互渗透的边缘学科，也是理论和实验密切结合的新兴学科. 它的发展和应用不仅为研究固态物质结构和特点提供了强有力的工具，而且为工业、农业、国防、现代科学技术以及人民生活提供更多更好的新型材料. 正因为如此，从六十年代中期开始，这一学科在国外发展极为迅速，各种类型的低能加速器很快转向这方面的研究工作.国际会议也相当多，如固体中原子碰撞会议 (Conference On Atomic Collisions in Solids)，离子束分析会议 (Conference On Ion Beam

Analysis). 离子束材料改性会议 (Conference On Ion Beam Modifications of Materials), 小型加速器在科学研究和工业中应用会议 (Conference On the Applications of Small Accelerators in Research and Industry) 以及粒子-固体相互作用的戈登研究会议 (Gordon Research Conference on Particle-Solid Interaction) 等. 国内不少单位正在大力开展这方面的研究和应用工作.

本书系统地讨论了粒子同固体相互作用物理学的基本理论、实验方法和在科学技术中的应用. 作者试图将三者有机地结合起来, 用较统一的观点处理各方面的典型事例. 理论上以林哈德 (Lindhard) 固体中原子碰撞的思想为线索,吸取国际上现有主要学派的长处,并根据作者自己研究工作的体会,从带电粒子与物质相互作用的基本物理过程、理论和实验研究方法,一直到该学科最新发展方向和最活耀的研究领域, 连贯地加以阐述.

除第一章引言部分为预备知识外,全书大致分为五个部分.第一部分, 带电粒子在无定形物质中的运动(第二、三章和第四章). 第二部分,带电粒子在晶体中运动的沟道效应(第五章和第六章). 第三部分, 离子注人和离子束混合(第七章和第九章). 第四部分为辐照损伤(第八章), 这一部分内容在粒子同固体相互作用中占有特殊位置. 第五部分论述的沟道辐射(第十章)是根据作者最近一篇评述性文章,并结合本人在这方面的实验工作经验所写的.

本书根据作者在南京大学物理系给研究生讲授"粒子同固体相互作用物理学"的讲义加以修改和补充而成. 写成本书时,作者对讲义内容作了很大的扩充和发展. 但是, 由于这一领域是蓬勃发展的新兴学科,内容丰富而广泛,并且正在向各个科学技术领域渗透,因此本书不可能包括所有的理论和实际问题,即便在书中已经讨论过的内容中,也还是有不少课题属于探索性的,加之时间紧迫和本人知识水平所限,书中一定存在不少缺点和错误,望读者批评指正.

作者曾于 1980—1982 年在美国纽约州立大学 (奥尔巴尼) 物

理系，与吉卜森（W. M. Gibson）、孙至锐（C. R. Sun）、陈显邦（N.Cue）和斯科茨（W. Scholz）等教授合作，从事粒子-固体相互作用方面多项课题的科学研究，受益匪浅，为本书写作打下一定基础．中国科学院学部委员、南京大学物理系冯端教授始终关心和支持本书的写作和修改工作，在百忙中审阅了全部原稿，并提出许多宝贵的修改意见．本书在写作过程中还得到其它许多国外专家教授的支持和帮助，如戴维斯（J. Davies）(加拿大 Chalk River)、迈耶（J. Mayer）(美国康乃尔大学)、费尔德曼（L. Feldman）(美国 Bell 实验室)、朱维干（W. K. Chu）(美国 North Carolina 大学)、皮克罗（S.Picraux）(美国 Sandia 实验室)、林哈德（J. Lindhard)、安德森（J. U. Andersen）和邦德罗卜（E. Bonderup）(丹麦科学院和 Aarhus 大学)和西格蒙德（P. Sigmund）(丹麦 Odense 大学)等；魏荣爵、程开甲、李恒德、龚昌德、杨福家、施士元、周瑞英、王忠烈和冯致光等教授和学者都以多种方式给予作者支持和鼓励．作者谨向他们表示衷心感谢．

王广厚

目　录

上　册

下　　册

目　　录

上　　册

下　　册

第一章 引 言

§1.1 粒子同固体相互作用物理学讨论范围

粒子同固体相互作用物理学是讨论一束质量为 M_1、电荷为 Z_1e 的带电粒子(有时叫做投射体)以速度 v 打到一片含有原子序数为 Z_2 和质量为 M_2 的固态物质(有时叫做靶)上所发生的相互作用现象和物理过程．主要入射粒子是质子和质量不等的各种离子，不包括中性粒子(如中子、中性介子和中微子等)．但是,有些中性粒子(如中子)同物质相互作用所引起固体物质的某些问题是可以用离子束分析的方法来很好地研究的，如反应堆壁和材料因中子辐照产生的辐射损伤．还有一些带电粒子的问题不是我们讨论的范围，如等离子体问题，包括聚变反应堆和聚变溅射现象等．至于入射粒子同靶原子核发生强相互作用的过程，我们除了对某些核反应过程所得到的结果加以研究(如阻塞效应测量复合核寿命等)外,对其它细节不作过多的描述和讨论．固态靶物质可以是单元素原子,也可以是多元素原子,甚至是以分子、高分子(如聚合物)的形式存在．但是为了讨论方便，在大多数理论处理过程中，我们仅限于一种元素构成的物质．有时在某些特定条件下，把固体中的原子当作气体原子来处理,这样取得的近似结果,同实验比较后再加以修正．

从基本粒子的观点看，带电轻粒子(这里系指电子和正电子)参与电磁相互作用和弱相互作用这两种过程．β^-衰变属于弱作用,不在我们讨论之列；正、负电子湮灭放出光子过程属于电磁相互作用，是粒子同固体相互作用的一个重要方面．近年发展起来的正电子谱仪已经广泛地应用到固体材料的研究中，并有不少专著发表,在此我们不对这方面的内容做详细讨论,只在后面章节讨

论到辐射损伤问题时，把它作为一种研究手段提出来.

辐射损伤是粒子同固体相互作用中一个突出问题，无论在理论上还是实际应用中均有重要意义，因此，我们单列一章加以讨论.

本书最后一部分将要讨论沟道辐射. 这种辐射是带电轻粒子在晶体沟道中运动，发射出一种与相干韧致辐射既相联系又有本质区别的辐射. 就其性质来说，它们都是电磁相互作用，但是产生的机理有所不同. 由于沟道辐射是强度大、单色性好、定向性能高而且是极化的辐射，因此在理论上和实验上都有重要的研究价值，我们也给予了应有的重视.

§1.2 各种能量下粒子同固体相互作用的应用

粒子同固体相互作用物理学这一学科一开始就是理论和实验的结合并且应用性很强的学科. 它起源于低能原子核物理，随着后来的发展逐渐超出了这个范围. 在 50 年代，用氢离子轰击半导体表面形成 p-n 结，作出了具有短波长响应的太阳能电池. 到了 60 年代，理论和实验都有了很大的发展. 在理论上，林哈德 (Lindhard) 等人提出了离子注入无定形靶中的射程分布理论 (即 LSS 理论)；实验技术上，离子注入硅探测器的问世和带电粒子在单晶中运动的沟道效应的证实，开辟了粒子同固体相互作用物理学研究和应用的新时代. 1967 年土耳克维奇 (Turkevich) 等人用类似 50 年前的卢瑟福 (Rutherford)、盖革 (Geiger) 和马斯顿 (Marsden) 的“α 粒子散射实验”，分析了月球上采集的土壤样品的组分(探险者 V 号科学研究的一部分)，这标志着粒子同固体相互作用物理学这一新兴学科向其它研究领域的开拓. 目前这一学科已深入到材料科学、环境科学、化学、生物学、地质、医学、甚至考古和美术工艺等领域. 表 1.2-1 给出了几种不同能量下入射带电粒子同固体相互作用的应用例子. 由于带电粒子，特别是在能量稍高(几十万电子伏特和几百万电子伏特)时，粒子同靶物质可以发生各种类型的反应，产生各种类型的二次粒子和射线，使得应用的

表 1.2-1　不同能量下粒子同固体相互作用的应用例子

应用 \ 离子 / 能量	H_1^+, D^+	$^4He^+$	$Li^+ \rightarrow Ne^+$	$>He^+$
100 电子伏 25 千电子伏	散射用于表面分析 中性化（原子状态）的研究	散射用于表面分析 中性化（原子状态）的研究	溅射（离子注入） 表面散射	溅射（离子注入） 表面散射
25 千电子伏 300 千电子伏	散射用于接近表面的分析（<1 微米） 沟道效应及表面分析	散射用于接近表面的分析 沟道效应及表面分析	离子注入	离子注入（溅射） 离子束混合
300 千电子伏 3 兆电子伏	核反应探测轻的元素 离子感生 X 射线检测微量杂质元素	卢瑟福背散射（RBS）分析接近表面的组分 沟道效应及表面分析		内壳层非弹性散射效应（离子注入） 离子束混合
3 兆电子伏以上		阻塞效应	核反应法分析物质中的氢 各种核反应分析	内壳层非弹性散射效应 阻塞效应测量核寿命
吉电子伏	高能沟道效应 1）导向高能带电粒子 2）测量 γ 粒子寿命 3）测量 Λ^+ 磁矩			

范围大大地扩展了，如二次离子质谱学和俄歇电子谱学等．这些内容将在以后章节中涉及到．带电轻粒子（电子和正电子）在晶体沟道中运动发射的沟道辐射是最近才发现的物理现象。其本身研

究还很不充分，存在着许多未知数，不过由于它具有许多特殊的优点，人们预言将有许多用途，譬如可以作为一个新型的强光源。这点我们将在最后一章加以论述。

§1.3 原子物理的概念和定义

一 玻尔原子和单位

原子核外电子与原子核之间的库仑相互作用有如下关系：

库仑力方程 $$\frac{Ze^2}{r^2}=\frac{m_e v_e^2}{r}$$

能量方程 $$E=\frac{1}{2}m_e v_e^2-\frac{Ze^2}{r}$$

角动量方程 $$m_e v_e r=n\hbar$$

也即 $$r=\frac{Ze^2}{m_e v_e^2}$$

或 $$r=\frac{n\hbar}{m_e v_e}$$

所以 $$v_e=\frac{Ze^2}{n\hbar}$$

其中 m_e 为电子质量，v_e 为电子运动速度，$\hbar=\frac{h}{2\pi}$ 为普朗克常数。若 $Z=1$ 为氢原子（$n=1$ 态），则有

$$v_e=v_B=\frac{e^2}{\hbar}=\text{玻尔速度} \tag{1.3-1}$$

实验上通常要测量一个质量为 M 的离子相对于玻尔速度的速度。一个质量为 M、动能为 E 的离子的速度（以玻尔速度为单位）是

$$\frac{v_e}{v_B}\cong\sqrt{\frac{E\,(\text{千电子伏})}{25(\text{千电子伏})M(\text{原子质量单位})}}$$

即

$$\frac{1}{2}Mv_B^2\cong 25\,(\text{千电子伏})\,M(\text{原子质量单位})$$

原子质量单位通常用 a.m.u. 表示。

$$r = \frac{n^2\hbar^2}{Zm_e e^2}$$

$$E = -\frac{1}{2}\frac{m_e Z^2 e^4}{n^2\hbar^2} \tag{1.3-2}$$

在氢原子 ($n = 1$ 态)情况下,玻尔半径和基态能量分别为

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \simeq 0.53 \times 10^{-8}(\text{厘米})$$

$$E_0 = -\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} \simeq -13.6(\text{电子伏})$$

粒子同固体相互作用的大多数情况均为库仑力作用,因此,经常需要求 e^2 值。为方便起见,我们在此给出它的近似值

$$e^2 \simeq 14.4 \text{ 电子伏·埃}$$

二 卢瑟福散射

在带电粒子穿进一固体时,库仑(卢瑟福)散射和屏蔽的库仑散射起着重要作用。为此,这里把卢瑟福散射定律和其标度性质简要介绍一下。

(1) 角偏转

求一个电荷为 Z_1e、质量为 M_1 的离子, 在电荷为 Z_2e、质量为 M_2 的库仑场中散射的偏转角 θ. 这种两体碰撞问题,用质心系计算较方便,在计算结束后,再变换成实验室坐标系.

如图 1.3-1 所示, 将入射粒子和靶原子相互作用看成两体碰撞系统,它满足动量和能量守恒. 若入射粒子为 v_0, 动能为 E_0, 则

$$E_0 = \frac{1}{2}M_1v_0^2 = \frac{1}{2}M_1v_1^2 + \frac{1}{2}M_2v_2^2 = E_1 + E_2$$

v_1 和 v_2 是碰撞后两粒子在实验室坐标系中的速度.

如果质心速度为 v_c, 质心动量为 $(M_1+M_2)v_c$, 质心能量为 $\frac{1}{2}(M_1+M_2)v_c^2$, 则质心速度可由下式决定:

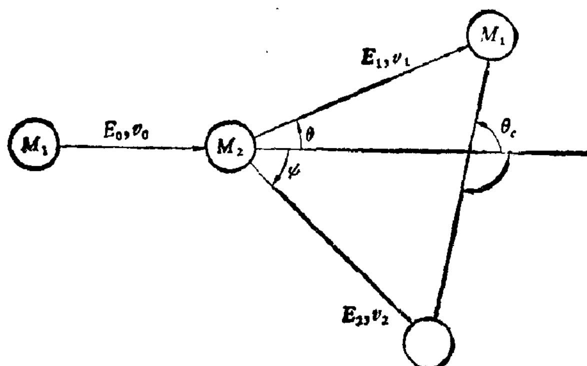


图 1.3-1　两体散射运动学

$$v_c = \frac{M_1}{M_1 + M_2} v_0$$

运动离子相对质心速度

$$v_a = v_0 - \frac{M_1}{M_1 + M_2} v_0 = \frac{M_2}{M_1 + M_2} v_0 \qquad (1.3\text{-}3a)$$

靶原子相对质心速度

$$v_b = -\frac{M_1}{M_1 + M_2} v_0 \qquad (1.3\text{-}3b)$$

在质心坐标系中，入射粒子和靶原子相对于质心动能之和 E (称为相对能量)可得

$$E = \frac{1}{2} M_1 \left(\frac{M_2}{M_1 + M_2}\right)^2 v_0^2 + \frac{1}{2} M_2 \left(\frac{-M_1}{M_1 + M_2}\right)^2 v_0^2$$

所以

$$E = \frac{1}{2} \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2} v_0^2 = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_0$$

图 1.3-2 给出在某一时刻，M_1 和 M_2 碰撞，M_1 和 M_2 距质心 C 的距离分别是 r_1 和 r_2，ϕ 是 M_1CM_2 线和粒子最小间距时垂直于 M_1CM_2 线间的夹角. M_1 的径向和切向分速度为 $\dot{r}_1$ 和 $r_1\dot{\phi}$，M_2 的为 $\dot{r}_2$ 和 $\dot{r}_2\dot{\phi}$. 在质心系中，总能量守恒，

$$\frac{M_2 E_0}{M_1 + M_2} = V(r_1 + r_2) + \frac{1}{2} M_1(\dot{r}_1^2 + r_1^2\dot{\phi}^2)$$

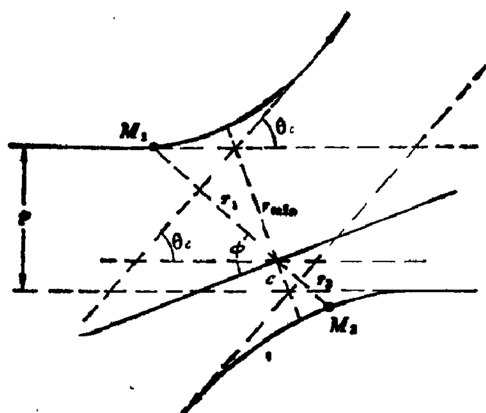


图 1.3-2 质心坐标系中，入射离子和被碰撞原子的轨道

$$+\frac{1}{2}M_2(\dot{r}_2^2+r_2^2\dot{\phi}^2)$$

将 $r_1=\frac{M_2}{M_1+M_2}r$，$r_2=\frac{M_1}{M_1+M_2}r$ 和其微商表达式代入上式，可导出

$$\frac{M_2E_0}{M_1+M_2}=V(r)+\frac{1}{2}\left(\frac{M_1M_2}{M_1+M_2}\right)(\dot{r}^2+r^2\dot{\phi}^2)$$

(1.3-4)

角动量守恒时，由（1.3-3a）式导出 M_1 在质心系中的速度

$$\frac{M_1M_2v_0p}{M_1+M_2}=M_1r_1^2\dot{\phi}+M_2r_2^2\dot{\phi}$$

并且

$$\dot{\phi}=\frac{pv_0}{r^2} \tag{1.3-5}$$

$\dot{r}=\frac{dr\,d\phi}{d\phi\,dt}=\dot{\phi}\frac{dr}{d\phi}$，把方程(1.3-5)代入方程(1.3-4)

$$\frac{d}{d\phi}\left(\frac{1}{r}\right)=\left\{\frac{1}{p^2}\left[1-\frac{V(r)}{E_0}\cdot\frac{M_1+M_2}{M_2}\right]-\frac{1}{r^2}\right\}^{1/2}$$

$$=\sqrt{\frac{1}{p^2}\left[1-\frac{V(r)}{E}\right]-\frac{1}{r^2}} \tag{1.3-6}$$

积分可得

$$\int_{\theta_c}^{\phi} d\phi = \int_{\frac{1}{r}=0}^{\frac{1}{r}} \frac{p d \frac{1}{r}}{\left[1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{P^2}{r^2}\right]^{1/2}}$$

$$= -\int_{r=\infty}^{r} \frac{p dr}{r^2\left[1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{p^2}{r^2}\right]^{1/2}} \quad (1.3\text{-}7a)$$

假定两粒子最接近的距离为 $r_{\min}$ 时，$\phi = \frac{\pi}{2}$，于是方程(1.3-7a)积分变成

$$\int_{\theta_c}^{\pi/2} d\phi = \frac{1}{2}(\pi - \theta_c) = \int_{-\infty}^{r_{\min}} \frac{p dr}{r^2\left[1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{p^2}{r^2}\right]^{1/2}}$$

$$\theta_c = \pi - 2p\int_{-\infty}^{r_{\min}} \frac{dr}{r^2\left[1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{p^2}{r^2}\right]^{1/2}} \quad (1.3\text{-}7b)$$

在最小间距 $r_{\min}$ 处，$\frac{dr}{d\phi} = 0$，因而，$\frac{d}{d\phi}\left(\frac{1}{r}\right) = 0$. 从方程(1.3-6)得到

$$\frac{V(r_{\min})}{1 - \frac{p^2}{r_{\min}^2}} = \frac{\frac{M_2}{M_1}}{1 + \frac{M_2}{M_1}} E_0 = \frac{M_2}{M_1 + M_2} E_0 = E \quad (1.3\text{-}8a)$$

取 $V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$，我们得到

$$\tan\frac{\theta_c}{2} = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2Ep} \quad (1.3\text{-}8b)$$

$\frac{Z_1 Z_2 e^2}{E}$ 是对头碰时最接近的距离，通常叫碰撞直径，定义

$$b \equiv \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E}$$

故

$$\tan\frac{\theta_c}{2} = \frac{b}{2p} \quad (1.3\text{-}8c)$$

(2) 散射截面

在散射角 θ 和碰撞参数 p 之间，存在着一一对应的关系，即碰撞参数 $p \to p + dp$ 之间的所有粒子散射到角度 $\theta_c \to \theta_c + d\theta_c$ 之内，如图 1.3-3 所示。

$$n(p)pdp = \sigma(\theta_c)\sin\theta_c d\theta_c \tag{1.3-9}$$

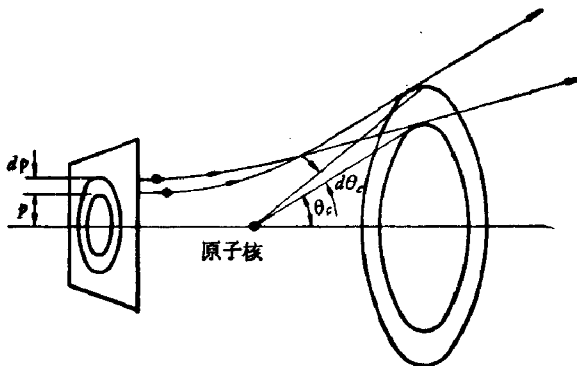


图 1.3-3 碰撞参数 $p \to p + dp$ 之间的粒子数正比于面积 $2\pi pdp$ 并散射到 $d\theta$ 角内

若 $n(p)$ 为均匀分布，则可取

$$\sigma(\theta_c) = \frac{pdp}{\sin\theta_c d\theta_c}$$

将 1.3-9 式代入得到

$$\sigma(\theta_c) = \frac{b^4}{16}\frac{1}{\sin^4\frac{\theta_c}{2}} \tag{1.3-10}$$

这就是卢瑟福散射截面公式。

关于卢瑟福散射公式有以下几点应加以说明：

(i) 卢瑟福散射公式是在质量中心系统中推出的（当然也直接可以从 $M_2 \gg M_1$ 的情况下得到），在实验室坐标系中截面可以表示成

$$\sigma_2(\theta) = \frac{b^2}{16}\left[\csc^4\frac{\theta}{2} - 2\left(\frac{M_1}{M_2}\right)^4 + \cdots\cdots\right] \tag{1.3-11a}$$

其中 θ 是实验室坐标系的散射角。若质量中心散射角为 θ_c，

$$\theta_c = \theta + \sin^{-1}\left(\frac{M_1}{M_2}\sin\theta\right)$$

或

$$\tan\theta = \frac{\sin\theta_c}{\cos\theta_c + \dfrac{M_1}{M_2}} \qquad (1.3\text{-}11b)$$

(ii) 标度值：$Z_1^2, Z_2^2, E^{-2}, \sin^{-4}\dfrac{\theta}{2}$.

(iii) 卢瑟福散射截面可以从量子力学的观点推导出来.考虑到散射振幅为

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{2m}{\hbar^2}\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}V(r)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r}$$

并且

$$\sigma(\theta) = |f|^2$$

若用屏蔽的库仑势 $V(r) = \dfrac{Ae^{-\lambda r}}{r}$, $A = Z_1Z_2e^2$，且散射为弹性散射 $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$，则有

$$f = -\frac{A}{4\pi}\frac{2}{\hbar^2}\int\frac{e^{-\lambda r}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{e}d\mathbf{r} = -\frac{A}{4\pi}\frac{2}{\hbar^2}\frac{4\pi}{\lambda^2 + k^2}$$

其中 $\mathbf{k} = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'|$ 且 $|\mathbf{k}| = 2k\sin\dfrac{\theta}{2}$. 所以，截面公式有

$$\sigma(\theta) = \frac{Z_1^2Z_2^2e^4}{E^2}\frac{1}{\left(\sin^2\dfrac{\theta}{2} + \dfrac{\sin^2\theta_m}{2}\right)^2}$$

式中 λ 定义为 $\lambda^2 = 4k^2\sin^2\dfrac{\theta_m}{2}$.

当 $\lambda \to 0$ 时，上式的 $\sigma(\theta)$ 就退化为卢瑟福散射截面，并且给出 λ 为有限值时库仑屏蔽对散射的影响。应该指出，我们以后所讨论的大多数情况，库仑屏蔽都是很重要的。

三　运动学

(1) 弹性散射

如图 1.3-1 所示，若 θ_c 是质量中心系中的散射方向，θ 是实

验室坐标系中的方位角，则由动量守恒和能量守恒可以得到

$$\frac{E_1}{E_0}=1-\frac{2M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}(1-\cos\theta_c) \tag{1.3-12}$$

及

$$\frac{E_2}{E_0}=1-\frac{E_1}{E_0}=\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}\sin^2\frac{\theta_c}{2} \tag{1.3-13}$$

(2) 核反应

一个核反应可表示为



$$x+X\rightarrow x'+X'$$

也可写成 $X(x,x')X'$，其中 x，X，x' 和 X' 分别代表入射粒子、靶原子核、出射粒子和剩余原子核．若其相应的质量为 M_1，M_2，M_3 和 M_4，则反应阈值 $Q_E=(M_1+M_2-M_3-M_4)c^2$，c 为光速．例如，$^{12}C(d,p)^{13}C$ 的反应阈值为 2.72 MeV．由运动学关系，我们可以得到出射粒子的能量

$$\sqrt{E_3}=\frac{\sqrt{M_1M_2E_1}}{M_3+M_4}\cos\theta\left\{1+\left[1+\frac{1+\frac{M_4}{M_3}}{\cos^2\theta}\left(\frac{M_4}{M_1}\left(1+\frac{\theta}{E_1}\right)-1\right)\right]^{\frac{1}{2}}\right\} \tag{1.3-14}$$

核反应探测轻粒子和离子（如物质中的氢）是很重要的。

四　原子的激发和电离——非弹性碰撞

在后面讨论的问题中，有相当一部分内容涉及到带电粒子穿进固体时的能量损失的机理．低能时，能量损失主要是由于原子核碰撞，也就是库仑和屏蔽库仑相互作用的结果，这点已经说过了．能量稍高时，能量损失主要是非弹性散射或与电子相互作用的结果，例如内壳层或外壳层电离，等离子体激元的产生和原子激发．在这一节中仅从简单的原子物理出发扼要地讨论非弹性散射的某些概念．一般地说，非弹性激发是很复杂的，所以它的详细论述放在第二章。

(1) 运动学考虑

通过方程(1.3-13)，我们可以得到一个质量为M的离子传给一个自由电子的最大能量是

$$\frac{E_m}{E_0}=\frac{4m_eM}{(m_e+M)^2}\simeq\frac{4m_e}{M} \tag{1.3-15}$$

对于2.0兆电子伏的$^4He^+$，则有

$$E_m=\frac{1}{2000}E_0=1\text{ 千电子伏}$$

实际上，一个离子在产生内壳层空穴过程中可以传给一束缚电子更多的能量。例如，2.0兆电子伏 $^4He^+$ 能电离Ga和As的K壳层，而这个壳层的束缚能约为1千电子伏。

当然，在碰撞远小于E_m的情况下，平均能量转移是一系列小的独立的能量损失过程的平均效应，很显然它包括一定的统计波动。

(2) 冲量近似

假定一个带电粒子(离子)向前运动，它与某个自由电子的碰撞参数为p，但其运动路径并不被扰动，如图1.3-4所示。

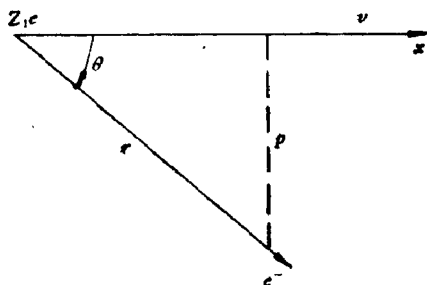


图1.3-4 冲量近似示意图

于是电子所受动量为

$$\Delta P_e=\int F_{\perp}dt \tag{1.3-16a}$$

而且，

$$F = \frac{Z_1 e^2 \sin\theta}{r^2}$$

$$r = \frac{p}{\sin\theta}$$

$$t = \frac{x}{v}$$

$$x = r\cos\theta = p\frac{\cos\theta}{\sin\theta}$$

那么

$$dt = \frac{dx}{v} = \frac{p}{v}\frac{-\sin^2\theta - \cos^2\theta}{\sin^2\theta} = -\frac{p}{v}\frac{d\theta}{\sin^2\theta}$$

所以

$$\Delta P_e = -\int \frac{Z_1 e^2 \sin^3\theta}{P^2}\frac{p}{v}\frac{d\theta}{\sin^2\theta}$$

$$= -\int_0^\pi \frac{Z_1 e^2}{pv}\sin\theta d\theta = \frac{2Z_1 e^2}{pv} \qquad (1.3\text{-}16b)$$

令 T_e 为转移给电子的能量，则有

$$T_e = \frac{\Delta P_e^2}{2m_e} = \frac{4Z_1^2 e^4}{2p^2 v m_e} = \frac{M}{m_e}\frac{Z_1^2 e^4}{E p^2} \qquad (1.3\text{-}17)$$

大多数情况下，我们所感兴趣的是单位距离的能量损失。即 $\frac{dE}{dx}$. 假定一材料的厚度是 dx，单位体积内含有N个原子，每个原子有 Z_2 个电子，则

$$\frac{dE}{dx} = 2\pi NZ\int T_e(p)pdp. \qquad (1.3\text{-}18)$$

下一章我们将主要讨论原子核碰撞的 $\frac{dE}{dx}$，电子碰撞的 $\frac{dE}{dx}$ 以及两者兼而有之.

参 考 文 献

[1] R. L. Sproull and A. Phillips, Modern Physics, Third edition, John Wiley and Sons, New York, Chichester, Brisbane, Toronto (1980).

[2] H. Goldstein, "Classical Mechanics", Addison-Wesley (1959).

[3] 王祝翔,《核物理探测器及其应用》, 科学出版社 (1964).

第二章　带电粒子在原子为无序分布物质中的运动

一个离子穿进固态物质，在它经过的路径上同靶原子作用，并通过一定的方式把能量传给靶原子，例如使靶原子激发或电离，离子也可以通过动量转移而失去一定能量，最后被靶原子散射出去，或停止在靶物质中. 采取什么方式取决于能量的损失情况. 从靶物质来说，就是靶物质对运动离子的阻止能力.

能量损失理论和实验的研究开始于本世纪初，这些研究提供了许多关于原子和原子核结构的重要信息. 例如，在原子核物理实验中，确定云室或乳胶中一定核反应产物的能量和质量；在给定实验条件下修正离子穿过薄窗或材料的能量，设计辐射屏蔽等.随着核能的利用和核技术的发展，粒子同各种物质的作用所产生的问题，例如辐射损伤、离子注入射程和射程分布、离子背散射和溅射、离子感生激发等等，都需要知道离子在物质中的能量损失情况.可以说，有关各种粒子在物质中的能量损失是粒子同固体相互作用物理学研究的基础.

本章给出了能量损失的基本定义和表达方式，即从电子阻止本领和核阻止本领两个方面讨论能量损失理论、实验测量以及理论与实验的比较，并对离子同固体相互作用中的电荷交换问题加以阐明.

§2.1　能量损失的定性描述

一　概念和定义

运动的离子在靶物质中的能量损失机理可以有以下几种类型：

(1) 激发和电离

运动离子把其能量传给靶电子，从而使一些靶原子达到激发态或电离态. 激发或电离的能量损失也叫电子能量损失，或称非弹性能量损失。这一机理是高速入射粒子能量损失的主要机理.

(2) 原子核碰撞

入射粒子通过弹性碰撞把能量传给靶原子核，结果使靶原子反冲. 由于是同靶原子核碰撞的能量损失，所以也叫核能量损失或弹性能量损失.这一机理是低速入射粒子能量损失的主要机理.

(3) 光子产生

在相对论速度下,入射粒子在介质中减速而发射光子(这就是韧致辐射).

(4) 核反应

当入射粒子和靶核满足一定的组合且达到反应阈能时，就可以发生核反应.

这里我们集中讨论前两种能量损失机理. 第三种仅在第十章中涉及到. 第四种是材料中元素分析的主要方法之一，将在第四章中讨论.

从微观看,由激发、电离或核运动引起的能量损失是一个不连续过程. 但是,从宏观来说,离子穿进一定材料中的能量衰减是一种集体效应，所以可以假定运动离子的能量损失是个连续的过程.

再假定,电子能量损失和核能量损失之间没有关联,因而可以分别独立地处理. 测定能量损失需要确定两个量，一个是离子在靶中所走过的距离 Δx，另一个是经过这段距离所损失的能量 ΔE.有时用质量密度 ρ_N 或原子密度 N 与距离的乘积（即 $\rho_N\Delta x$ 或 $N\Delta x$)，分别表示单位面积靶物质数量和单位面积的原子数. 原子

密度和质量密度之间的关系是

$$N = N_0\rho_N / M_2 \tag{2.1-1}$$

N_0 是阿伏伽德罗常数，M_2 是靶原子质量．能量损失可以表示成几种不同形式，通常有：

$\frac{dE}{dx}$：电子伏/埃，兆电子伏/厘米 (2.1-2)

$\frac{1}{\rho_N}\frac{dE}{dx}$：电子伏/(微克/厘米^2)，千电子伏(微克/厘米^2)，兆电子伏/(微克/厘米^2)

$\frac{1}{N}\frac{dE}{dx}$：电子伏/(原子/厘米^2)，电子伏 · 厘米^{2}有些文献中，出现许多从上述两种派生出来的单位，并都称为能量损失或 $\frac{dE}{dx}$．因此，在比较测量结果时，要特别注意单位的换算．

现在，大多数人把 $\frac{1}{N}\frac{dE}{dx}$（电子伏 · 厘米^2）看作阻止截面，实验上常用 ε 来表示

$$\varepsilon \equiv \frac{1}{N}\frac{dE}{dx} \tag{2.1-3}$$

理论研究则常用 S

$$S \equiv \frac{\langle \Delta E \rangle}{N\Delta x} = \sum_i T_i P_i = \int T d\sigma \tag{2.1-4}$$

$\langle \Delta E \rangle$ 是靶厚度为 Δx 的平均能量损失，$P_i = N\sigma_i(Q_1, M_1, v, Z_2 e, M_2)$ 是碰撞几率，T_i 是以几率 P_i 传给第 i 个电子的动能，积分则是单次碰撞中所有可能的能量损失取和．(2.1-4) 式中的 $d\sigma$ 是能量损失截面（阻止过程），因此也叫阻止截面．所以，(2.1-3) 和 (2.1-4) 具有相同大小和含义．采用阻止截面的好处是，在系统研究中，ε 描述原子对原子的能量损失，外推起来比较方便，而 $\frac{dE}{dx}$ 对于不同的材料有所不同，甚至相同的材料在密度不同的情况下也有所不同，故外推起来不方便．

在建立 (2.1-4) 式时实际上做了如下假定：

(i) 截面中所含有的电荷 Q_1 是入射粒子电荷，在许多情况下并不明显．从加速器出来的离子，经过磁铁偏转，其电荷状态是完全确定的．但是，当离子进入物质后，在同物质原子碰撞过程中，将丢掉或得到电荷，它的电荷状态会发生变化，这点在本章后面还要讨论．不过，目前我们仍然设想 Q_1 在物质中是确定的．如 $Z_1 = 1$ 就是质子 $Q_1 = e$，$^4He^+$ 虽然 $Z_1 = 2$，但跟着一个电子，所以 $Q_1 = e$（注意：今后在没有特别说明的情况下，$Q_1 = Z_1e$ 就表示入射粒子为完全电离了的离子）．

(ii) 把入射粒子同靶物质中原子相继碰撞，看作入射粒子和靶原子之间独立的两体碰撞．这就是说：第一，忽略了靶原子之间的极化效应．不同的原子之间可以通过极化相互作用，入射粒子的电场使一个原子极化，也即是引进了一个电场，而这个电场又对别的原子起作用．结果作用在第二个原子上的总电场同入射粒子与这个原子直接相互作用是不同的．在物质密度低时这种极化现象很小，可以不计．第二，忽略了相继碰撞之间的相关效应．在碰撞参数的经典描述中，如果一个粒子通过晶体，则相继碰撞的各碰撞参数之间存在着关联．为了避免这个问题，本章中仅讨论物质中的原子是随机分布的（无序的）（如非晶态，当然也适用液体和气体）这一简单情况．对于晶体，若取向合适，也是适用的，如取偏离晶格低指数轴或平面方向．

能量损失的最早理论是由玻尔 (Bohr)[1,2] 建立的，这一理论对能量损失过程的基本特性作了定量的描述，并被量子力学的引入所证实．贝特 (Bethe)[3-5] 进一步发展了玻尔理论．林哈德 (Lindhard)[6-8] 和费尔索夫 (Firsov)[9,10] 从不同的角度讨论了低速离子的能量损失．

图 2.1-1 是质子在硅中的阻止截面示意图，入射粒子的能量范围从几千个电子伏（千电子伏）到百亿电子伏（10^4 兆电子伏 = 10吉电子伏）．大约在 100 千电子伏处有一个峰，而在 50 亿电子伏(5吉电子伏)处有一个下沉，之后又开始上升．在相对论下，能量损失增加是由于光子发射，韧致辐射和契仑柯夫辐射所致．这

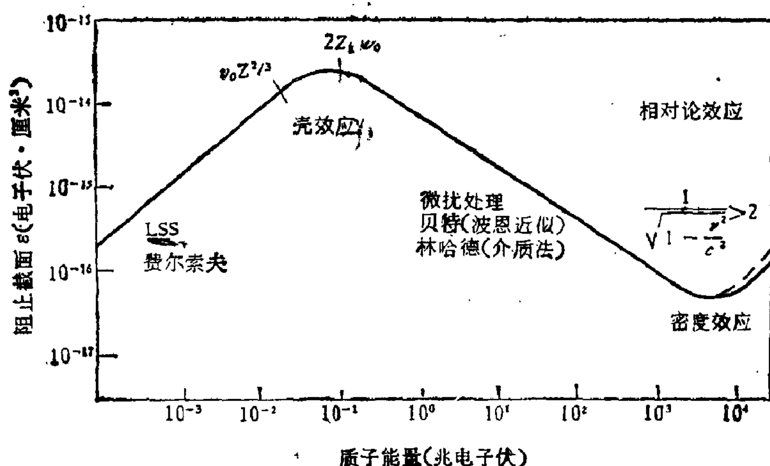


图 2.1-1 质子在硅中的阻止截面. 曲线的形状在不同的能区用不同的理论描述

里主要讨论非相对论能区，第六章最后将会讨论某些相对论粒子在晶格沟道中的运动情况. 图中的标记以后会逐渐谈到，现在只是说明不同理论的适用范围. 根据林哈德等人[7,11]的理论(即 LSS 理论),即使在入射粒子能量很低的情况下，核能量损失也比电子能量损失小得多. 例如，1 万电子伏 (10 千电子伏)质子在硅中运动所受到的核阻止，只占总阻止的百分之二. 若是 1 千电子伏特时,核阻止占百分之十六. 因此,在一般情况下，中能和高能轻粒子入射,只考虑电子阻止能力. 然而,核碰撞会在靶中产生不同的效应,如辐射损伤问题,这就要集中讨论核阻止截面. 它的实际应用将在第七章和第八章中详细论述.

若入射粒子比质子重，能量损失的特性同质子情形相似. 图 2.1-2 是一些较重的离子在硅中阻止截面的曲线[12],不过作了坐标归一,分别用 ε/Z_1^2 和 E/M_1 来代替阻止截面 ε 和入射粒子能量 E. 当 $Z_1 = M_1 = 1$ 时,即为质子的阻止截面曲线，和图 2.1-1 一样. 从阻止截面曲线与入射粒子关系 (图 2.1-2) 中，可以观察到如下几个特点:

(i) 在速度高时，ε/Z_1^2 趋向于单根曲线.

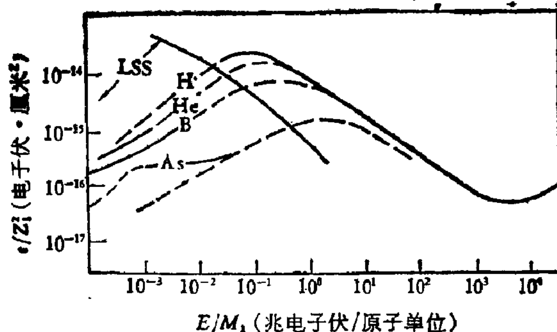


图 2.1-2 一些重离子在硅中阻止截面的曲线簇[12]

(ii) Z_1 较高，ϵ/Z_1^2 峰的位置在速度较高的位置. 峰位随 Z_1 成比例增加.

(iii) 速度较低时，ϵ/Z_1^2 的曲线簇接近平行.

(iv) 当速度很低时，核阻止截面开始影响曲线，而且入射粒子质量数愈大影响也愈大.

上述这些特性纯属经验和唯象观察的结果. 后面两节中，我们将对不同速度范围的主要理论进行讨论，从而给出阻止截面同入射粒子及其速度以及靶原子之间的关系.

二 库仑散射和能量损失

在深入讨论两种主要能量损失机理——电子阻止和核阻止之前,我们先在库仑散射条件下,对它们作些数量级的估计和比较.

在第一章引言中,已经谈到一个质量为 M_1、原子序数为 Z_1 的入射粒子,同质量 M_2、原子序数为 Z_2 的靶核相碰撞,在库仑场作用下得到

$$\tan\left(\frac{\theta}{2}\right)=\frac{b}{2p}$$

θ 是质量中心系统（CM）中的散射角. 由能量和动量守恒原理，可以推出对头碰时传给靶粒子的最大能量为

$$T_{\max}=\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}E \qquad (2.1\text{-}5)$$

一般情况下的能量转移

$$T = T_{max}\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \tag{2.1-6}$$

由方程（1.3-8c）和(2.1-6)，得到

$$T = \frac{T_{max}}{1+\left(\frac{2p}{b}\right)^2} = \frac{2Z_1^2Z_2^2e^2}{M_2v^2}\frac{1}{p^2+\left(\frac{b}{2}\right)^2} \tag{2.1-7}$$

从图 1.3-3 可以看出，微分散射截面的表达式为

$$d\sigma = 2\pi p dp = \pi d\left(p^2+\left(\frac{b}{2}\right)^2\right) = -\frac{2\pi Z_1^2Z_2^2}{M_2v^2}\frac{dT}{T}. \tag{2.1-8}$$

将(2.1-7)和(2.1-8)式代入(2.1-4)式，则损失给原子核的能量表示为

$$S_n = \int Td\sigma = T_{max}2\pi\int_{p_{min}}^{p_{max}}\frac{pdp}{1+\left(\frac{2p}{b}\right)^2} \tag{2.1-9}$$

从方程(2.1-7)，(2.1-9)式可以写成

$$S_n = T_{max}\left(\frac{b}{2}\right)^2\pi\int_{T_{min}}^{T_{max}}\frac{dT}{T} \tag{2.1-10}$$

所以

$$S_n = \frac{2\pi Z_1^2Z_2^2e^4}{M_2v^2}\ln\frac{T_{max}}{T_{min}} \tag{2.1-11}$$

其中为避免积分发散而引进低能限 T_{min}，它对应于 p_{max}，当距离很远时，原子核受到电子屏蔽，入射粒子和靶原子核之间的相互作用势不再是 $\frac{1}{r^2}$。这时如果入射粒子同靶电子之间相互作用能量小于电子电离或激发能，则不会有能量转移.

同样可以导出由靶电子引起的能量损失，这时(2.1-11)式中的 M_2 变成电子质量 m，Z_2 变成 1，于是有

$$S_e(\text{一个电子}) = \frac{2\pi Z_1^2e^4}{mv^2}\ln\frac{T_{max}}{T_{min}} \tag{2.1-12}$$

由于每个靶原子有 Z_2 个电子，所以每个原子的电子能量损失为

$$S_e = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2 e^4}{mv^2} \ln \frac{T_{max}}{T_{min}} \tag{2.1-13}$$

由 (2.1-13) 和 (2.1-11) 可得

$$\frac{S_n}{S_e} = \frac{Z_2 m}{M_2} \simeq \frac{1}{4000} \tag{2.1-14}$$

可见,与电子能量损失比较起来,核能量损失是很小的. 推导 (2.1-13)式还可以有其它的方式,但无论哪种方式,都有一个必要条件,这就是入射粒子速度必须比靶电子快, 这样才能把电子看作是静止的. 这时把入射粒子速度与束缚得最松的靶电子速度相比较,就有

$$v \gg v_0 = \frac{e^2}{\hbar} = \frac{c}{137};$$

反之,如果入射粒子的速度相当慢,则所有的电子都可以调节其轨道运动,以适合入射粒子的瞬时位置,这样在散射过程中从入射粒子吸收的能量也比较少. 所以,在低能条件下电子能量损失小(如图 2.1-1 和 2.1-2). 这就是所谓玻尔绝热近似[1]假设.

三 托马斯-费米原子

在研究离子同靶原子碰撞过程中, 常常要对入射离子或靶原子进行描述. 描述原子系统有两种方法, 一是哈特雷 (Hartree)-福克 (Fock) 的自洽场方法[13], 这是很精确的方法, 但对多电子系统却过于复杂;一是托马斯(Thomas)[14]-费米(Fermi)[15]的统计方法,把原子内部的电子看成简并气体,这样一个原子(或离子)的电子密度是原子序数的函数. 或者说,原子的托马斯-费米描述是把其电子密度 $n_e(r)$ 和总势能 $V(r)$ 看成仅是离原子核距离 r 的函数. 总势能是电荷为 Ze 的原子核势和所有电子势之和. 假定 $n_e(r)$ 和 $V(r)$ 为球对称, 满足经典的泊松 (Poisson) 方程

$$\Delta V(r) = -4\pi(-e)n_e(r) - 4\pi Ze\delta(\mathbf{r}) \tag{2.1-15}$$

Z 可以代表靶原子,也可以代表离子的原子序数.

讨论在相空间体积 $dVd^3(\hbar\mathbf{k})$ 内,可以容纳 $2\cdot\frac{dVd^3(\hbar k)}{h^3}$ 个电

子，这些电子填充了 $0\leqslant k\leqslant k_F$ 间隔内所有的量子态，因为在稳定的量子力学系统中，电子总是从最低能态开始填满。所以，体积元 dV 内的电子数 dN 有

$$dN=dV\cdot\frac{2\cdot\frac{4\pi}{3}k_F^3}{(2\pi)^3}=dV\frac{k_F^3}{2\pi^2}$$

于是电子密度 $n_e(r)=\dfrac{dN}{dV}$ 和费米动量 $P_F=\hbar k_F$ 之间有这样的关系

$$P_F^3(r)=3\pi^2\hbar n(r)\tag{2.1-16}$$

根据能量守恒原理

$$\frac{P_F^2(r)}{2m}+(-e)V(r)=(-e)\zeta\tag{2.1-17}$$

ζ 是常数。由 (2.1-16) 和 (2.1-17) 式给出电子密度 $n_e(r)$ 和 $[V(r)-\zeta]$ 之间的关系

$$n_e(r)=\frac{(2me)^{3/2}}{3\pi^2\hbar^3}[V(r)-\zeta]^{3/2}\tag{2.1-18}$$

再由方程 (2.1-15) 和 (2.1-18) 导出

$$\Delta[V(r)-\zeta]=\frac{4}{3\pi}\frac{e(2me)^{3/2}}{\hbar^3}[V(r)-\zeta]^{3/2}-4\pi Ze\delta(\mathbf{r})\tag{2.1-19}$$

引入边界条件

$$V(r)-\zeta\xrightarrow[r\to0]{}\frac{Ze}{r}\tag{2.1-20}$$

则舍去了 δ 函数项。

用辅助函数

$$V(r)-\zeta=\frac{Ze}{r}u(x)\tag{2.1-21}$$

和

$$x=\frac{2^{7/3}}{(2\pi)^{2/3}a_0}Z^{1/2}r\tag{2.1-22}$$

于是 u 在边界条件下为

$$u(0)=1,\quad u(\infty)=0 \tag{2.1-23}$$

时，满足微分方程

$$\frac{d^2u(x)}{dx^2}=u^{3/2}(x)x^{-\frac{1}{2}} \tag{2.1-24}$$

其中，$\frac{r}{x}=\frac{(2\pi)^{2/3}}{2^{7/3}}a_0Z^{-1/3}=0.8853a_0Z^{-1/3}$ 定义为“原子半径”，$a_0=0.529$ 埃。

费米已把函数 u 和 x 的依赖关系制成表格，由该表和方程(2.1-21)很容易求出 $V(r)$，再由(2.1-18)式，即可得到电子密度 $n_e(r)$。图 2.1-3 给出了用托马斯-费米模型计算电子密度随 r 变化的曲线，这条曲线与哈特雷方法得到的结果符合得很好，特别是对于高 Z（如图 2.1-3b）情况，结果更为精确。在两种极限情形下，当 $r\to 0$ 时，$n_e(r)\sim r^{-3/2}$，电子密度相当于随 $\frac{1}{r}$ 变化；当 $r\to\infty$ 时，则有 $n_e(r)\sim r^{-6}$。这也是哈特雷自洽场法的结果。

现在来简要说明一下托马斯-费米原子的能量标度。系统的总能量由三部分组成

$$E_t=E_{\text{kin}}+E_{e,e}+E_{e,n} \tag{2.1-25}$$

第一项是 E_{kin} 电子的动能

$$E_{\text{kin}}=\int_0^\infty 4\pi r^2dr\int_0^{P_F(r)}2\frac{4\pi p^2dp}{h^3}\frac{p^2}{2m} \tag{2.1-26a}$$

第二项 $E_{e,e}$ 是电子之间的排斥势能

$$E_{e,e}=\frac{1}{2}e^2\int d^3\mathbf{r}\int d^3\mathbf{r}'\frac{n_e(r)n(r')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{2.1-26b}$$

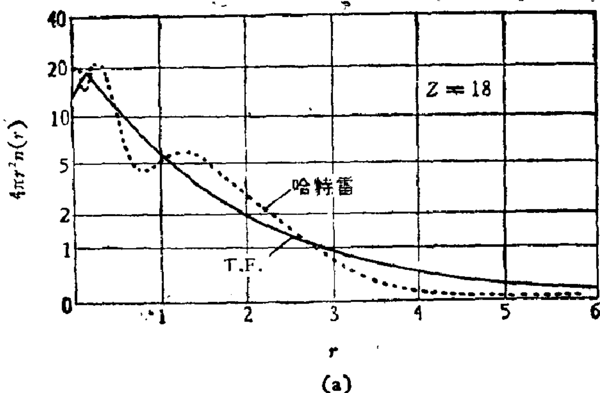
第三项 $E_{e,n}$ 是电子和原子核相互作用能量

$$E_{e,n}=-Ze^2\int_0^\infty\frac{n_e(r)}{r}4\pi r^2dr \tag{2.1-26c}$$

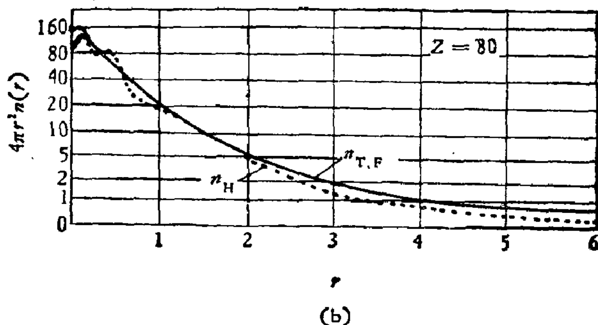
经过若干技巧运算后得到总能量

$$E_t=-0.769Z^{7/3}\frac{e^2}{a_0}=-20.94Z^{7/3}\text{ 电子伏} \tag{2.1-27}$$

外推到 $Z=1$ 的氢原子情况，得到 E_t 的值接近 -13.6 电子伏。并



(a)



(b)

图 2.1-3 托马斯-费米原子统计模型及哈特雷自洽场方法的电子径向密度分布[16]图中 $4\pi r^2 n_e(r)$ 是以 $\frac{1}{a_0}$ 为单位，r 以 a_0 为单位（a_0 为玻尔半径）. a）氩原子；b）汞原子

且，总势能 $E_V = E_{e,e} + E_{e,n}$，即

$$E_t = -2E_{\text{kin}} \tag{2.1-28}$$

和

$$E_{e,n} = -7E_{e,e} \tag{2.1-29}$$

所以，在托马斯-费米原子中的一个电子"平均速度" $\sqrt{\langle v^2\rangle}$ 为

$$\sqrt{\langle v^2\rangle} = 1.24 v_0 Z^{2/3} \tag{2.1-30}$$

托马斯-费米模型是处理静态原子的，但是，只要把相似性的描述加以扩展，包括原子内部随时间的演变，就可以用到动力学过程的描述上去. 此时应有

$$\text{时间} \sim \text{长度}/[\text{每个电子的动能}]^{1/2}$$
$$\sim Z^{-\frac{1}{3}}/Z^{2/3} = Z^{-1} \qquad (2.1\text{-}31)$$

所以，本征频率必须正比于 Z，决定微扰后激发能量的频率差也正比于 Z. 不仅单粒子激发是如此，集体的等离子振荡也是如此. 因而，讨论快速粒子在物质中运动受到电子阻止需要计算原子激发能和相应的偶极振子强度时，托马斯-费米模型也会给出合理的动力学关系，特别是原子对弱扰动(远碰)的响应.

§2.2 核 阻 止

上节已经谈到，当入射粒子为重离子，速度又低时，能量可以从入射粒子通过两原子核屏蔽电荷之间的静电相互作用传给靶原子核. 尽管核阻止在卢瑟福碰撞范围内，对总阻止截面的贡献很小，然而在辐射效应理论中，如辐射损伤、溅射、投影射程和总射程之间的关系等问题中，它是很重要的，所以本节将详细地加以讨论. 在描述带电粒子同靶原子核之间总动量转移时，用托马斯-费米原子模型是极为方便的. 如果离子(带电的入射粒子)和靶原子的相互作用力是两个原子核(即离子的原子核和靶原子的原子核)之间距离 r 的函数，则根据经典描述，可以得到相对运动的偏转角 θ 和碰撞参数 p 之间的关系[见(1.3-7)式]. 然后由函数 $\theta(p)$ 立即得到核平均的能量损失 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n$ 和均方偏转角 $\bar{\theta}^2$. (2.1-9)式重写为

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n = N\int d\sigma T = \int 2\pi p\alpha p T_{\max}\sin^2\frac{\theta(p)}{2} \qquad (2.2\text{-}1)$$

和

$$\bar{\theta}^2 = Ndx\int 2\pi p dp\theta^2(p) \qquad (2.2\text{-}2)$$

根据玻尔理论，一个原子数为 Z_1、速度为 v 的离子，有效电荷应为 $Z_1^* e$，其中 Z_1^* 为

$$Z_1^* \simeq Z_1^{1/3}\frac{v}{v_B}, \quad v \lesssim v_B \cdot Z_1^{2/3} \qquad (2.2\text{-}3)$$

其中 $v_B = \frac{e^2}{\hbar}$. 在上节所述的原子托马斯-费米统计模型的描述中,电子的速度与 $Z^{2/3}$ 成比例. 因此,从 (2.2-3) 式可以看到,在离子速度超过其电子轨道速度之前,离子是不会具有全电荷的. 据此,一个重离子在物质中慢化容易用经典力学来处理. 假定入射粒子质量 $M_1=2M_pZ_1$(M_p 为质子质量),可以求出 $v_1 = v_B \cdot Z_1^{2/3}$ 所对应的能量

$$E_1 = Z_1^{7/3} \cdot 50 \text{ 千电子伏} \tag{2.2-4}$$

对于 $Z_1 = 50$ 的离子,能量 E_1 可达 460 兆电子伏. 但是,一般离子都伴有大量电子,能量值会远低于这个值. 同时,随着能量的增加,会出现更激烈地碰撞,这时相互作用可用电荷 Z_1e 和 Z_2e 之间的屏蔽库仑场来描述.

在经典计算中,由一般的相互作用势 $V(Z_1, Z_2, r)$ 所得到的偏转角 θ 依赖于 4 个参数

$$\theta = \theta(Z_1, Z_2, M_0v^2, p) \tag{2.2-5}$$

其中 $M_0 = \frac{M_1M_2}{M_1 + M_2}$ 为约化质量.因此微分散射截面 $d\sigma = 2\pi p dp$ 也依赖于 4 个参数. 通过简化的相互作用势,可以把 $d\sigma$ 中含四个参量的表示式减少成两个参量.一般来说,这已是最少的参量数目了. 当然,如果引进另一类相似性,则可进一步简化,使得微分散射截面只依赖于一个参量.

入射粒子和靶原子之间相互作用力 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 由这个双原子系统总基态能量 $U(Z_1, Z_2, r)$ 的微商给出

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\mathrm{grad}_{\mathbf{r}} U(Z_1, Z_2, r) \tag{2.2-6}$$

为方便起见,常常测量能量 U 相对于两粒子分离无穷远时的值.即把 (2.2-6) 式中的 $U(Z_1, Z_2, r)$ 换成相互作用势

$$V(Z_1, Z_2, r) = U(Z_1, Z_2, r) - U(Z_1, Z_2, r = \infty). \tag{2.2-7}$$

一 简单的相互作用势

根据托马斯-费米图象,讨论相互作用势. 当电荷 Z_1e 和 Z_2e

所属的两个原子核之间距离 r 为一定时，我们可把 (Z_1+Z_2) 个电子以这样的方式来分配，即在电子气体平均动能和密度之间的关系为局域作用时，系统的总能量最小．这个模型的相互作用势为

$$V(r)=\frac{Z_1Z_2e^2}{r}u\left(\frac{Z_1}{Z_2},\ \frac{r}{a}\right) \tag{2.2-8}$$

其中 u 为屏蔽函数，它只含两个独立参数，表示两原子核之间库仑斥力的减弱．在渐近极限 $Z_1\ll Z_2$ 的条件下，情况就如同一个原子与一个小的“检验”电荷 Z_1e 之间的相互作用．这种情况下类似于讨论托马斯-费米原子，因为这时“检验”电荷就是单个电子．因此，我们可以得到在极限 $Z_1/Z_2\ll 1$ 和 $Z_2/Z_1\ll 1$ 时的屏蔽函数

$$u=u\left(\frac{r}{a}\right) \tag{2.2-9}$$

$u\left(\frac{r}{a}\right)$ 为托马斯-费米原子屏蔽函数，屏蔽长度 a 为

$$a=0.8853a_0\begin{cases}Z_2^{-1/3} & Z_1\ll Z_2\\ Z_1^{-1/3} & Z_1\gg Z_2\end{cases} \tag{2.2-10}$$

林哈德等人[17,18]进一步研究了托马斯-费米模型所得到的屏蔽函数 $u\left(\frac{r}{a}\right)$，看它是否可以近似地替代 (2.2-8) 式中的原子-原子相互作用势的屏蔽函数 u．当考虑另一个极端情况 $Z_1/Z_2=1$ 时，发现在一定的近似程度范围内，任何一点总的电子密度是两个相互渗透非扰动原子密度之和．假定屏蔽长度 $a=0.8853a_02^{-1/2}Z_1^{-1/3}$，方程 (2.2-9) 适用于两原子核之间距离 r 相当宽的范围．

由于在 $Z_1/Z_2\ll 1$，$Z_1/Z_2=1$ 和 $Z_1/Z_2\gg 1$ 三种情况下的 $V(r)$ 均取相同的数学表达式，因此，适当选择屏蔽长度，就可把这个表示式应用到更一般的情况中去．玻尔把 (2.2-10) 式两个原子的屏蔽长度组合起来，得到

$$a=0.8853a_0(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3})^{-\frac{1}{2}} \tag{2.2-11}$$

如果用其它形式的 Z_1 和 Z_2 组合，只要符合渐近极限，也可以得到大致相同的 $V(r)$ 表达式，其中 $a_0=0.529$ Å．

把原子间相互作用势 $V(Z_1, Z_2, r)$ 代入经典运动方程，得到

关于极坐标 (r, φ) 的相对运动方程

$$\frac{d^2}{d\varphi^2}(r^{-1}) + r^{-1} - \frac{r^2}{M_0 v^2 p^2}\frac{\partial V(Z_1, Z_2, r)}{\partial r} = 0 \quad (2.2\text{-}12)$$

当 $\varphi = 0$ 时，

$$\frac{1}{r} = 0 \qquad \frac{d}{d\varphi}\left(\frac{1}{r}\right) = \frac{1}{p}$$

用 (2.2-8) 和 (2.2-9) 势表示式， 散射角 $\theta = \pi - \varphi(r \to \infty)$ 只是两个变量的函数

$$\theta = \theta\left(\varepsilon_L, \frac{p}{a}\right) \quad (2.2\text{-}13)$$

这里 ε_L 是能量的无量纲量度

$$\varepsilon_L = \frac{1}{2} M_0 v^2 / (Z_1 Z_2 e^2 / a) = \frac{a}{b} \quad (2.2\text{-}14)$$

b 为碰撞直径. 于是，我们可以看到，在适当的近似下，偏转角 θ 和能量 ε_L 可以组合成一个单变数，因此，微分散射截面变成一个变量的函数. 注意，除了很轻的入射粒子或很轻的靶原子外，碰撞参数总满足不等式

$$\kappa_n = \frac{2 Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} > 1 + \frac{p^2}{a^2} \quad (2.2\text{-}15)$$

因此，我们在经典力学范围内对偏转角及其散射截面进行讨论是合理的. 即使在高速轻粒子情况下，多重散射在接近非屏蔽库仑场中的偏转也是占主要的，经典力学和量子力学这时都可以得到卢瑟福散射截面.

二　散射截面

(1) 小角散射

假定在质量中心系中散射角 θ 很小[1]，采用图 2.2-1 所示的动量近似和屏蔽库仑势

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} u\left(\frac{r}{a}\right) \quad (2.2\text{-}16)$$

---

1) 这里用 θ 直接表示质量中心系中的散角，略去下标.

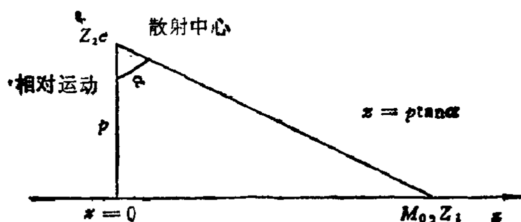


图 2.2-1　动量近似示意图

$u\left(\frac{r}{a}\right)$ 可以是托马斯-费米屏蔽函数，则我们有

$$(M_0v)\theta = \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\partial}{\partial p} V(\sqrt{p^2+z^2})\frac{dz}{v},\ \theta \ll 1 \tag{2.2-17}$$

$$\theta = -b\int_0^{\infty} dz \frac{\partial}{\partial p}\left[\frac{1}{\sqrt{p^2+z^2}} u\left(\frac{\sqrt{p^2+z^2}}{a}\right)\right]$$

$$= b\int_0^{\infty} dz\left[\frac{p}{(p^2+z^2)^{3/2}} u\left(\frac{\sqrt{p^2+z^2}}{a}\right) - \frac{p/a}{(p^2+z^2)}\right.$$

$$\left.\times u'\left(\frac{\sqrt{p^2+z^2}}{a}\right)\right] = \frac{b}{a}\cdot\frac{a}{p}\int_0^{\pi/2} d\alpha\left[\cos\alpha u\left(\frac{p/a}{\cos\alpha}\right)\right.$$

$$\left. - \frac{p}{a} u'\left(\frac{p/a}{\cos\alpha}\right)\right] \tag{2.2-18}$$

引入

$$g(\zeta) = \int_0^{\pi/2} d\alpha\left[\cos\alpha u\left(\frac{\zeta}{\cos\alpha}\right) - \zeta u'\left(\frac{\zeta}{\cos\alpha}\right)\right] \tag{2.2-19}$$

于是，偏转角 θ 的表示式为

$$\theta = \frac{b}{p} g\left(\frac{p}{a}\right) = \frac{1}{\varepsilon_L}\frac{1}{p/a} g\left(\frac{p}{a}\right) \tag{2.2-20}$$

其中 ε_L 是(2.2-14)式所表示的能量量度．所以

$$\varepsilon_L\cdot\theta = \frac{1}{p/a} g\left(\frac{p}{a}\right),\ \theta \ll 1 \tag{2.2-21}$$

表明在小角散射时，$\varepsilon_L\cdot\theta$ 的乘积是单变量 $\frac{p}{a}$ 的函数．因此，

(2.1-8) 式的微分散射截面 $\pi d(p^2)$ 可以表示成 πa^2 乘以无量纲变数 $\varepsilon_L\cdot\theta$ 的函数. 这是相似性结果的特点. 其一，测量了能量 E 和碰撞参数 p 的物理参数，再选取适当的单位，就可以把研究入射粒子和靶相互作用的所有可能组合的情况，简化为单个情况加以研究；其二，把描述相互作用过程的参量数目减少到最少.

若取函数 $u(r/a)$ 为指数函数的形式

$$u\left(\frac{r}{a}\right)=\frac{k_s}{s}\frac{1}{\left(\frac{r}{a}\right)^{s-1}},\quad 1<s<4 \tag{2.2-22}$$

则可以进行分析形式的计算. 为方便起见，取常数为 $\frac{k_s}{s}$. 根据(2.2-22) 式，可使 (2.2-21) 化为

$$\begin{aligned} g(\zeta) &= \frac{k_s}{s}\int_0^{\pi/2} d\alpha\left[\cos\alpha\frac{\cos^{s-1}\alpha}{\zeta^{s-1}}-\zeta(1-s)\frac{\cos^s\alpha}{\zeta^s}\right] \\ &= k_s\gamma_s\frac{1}{\zeta^{s-1}} \end{aligned} \tag{2.2-23}$$

$$\gamma_s\equiv\int_0^{\pi/2} d\alpha\cos^s\alpha=\frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{s+1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{s}{2}+1\right)} \tag{2.2-24}$$

由(2.2-24)式给出的 s 为各种值时，所对应的 γ_s 值列于表2.2-1中.

表 2.2-1 不同 s 值时的 γ_s 值

s	1	3/2	2	5/2	3	4	5	……	∞
γ_s	1	0.874	$\pi/4$	0.719	2/3	$3\pi/16$	8/15	……	$\sqrt{\frac{\pi}{2s}}$

将 (2.2-23) 式代入 (2.2-21) 式后，得到

$$\varepsilon_L\cdot\theta=k_s\cdot\gamma_s\left(\frac{a}{p}\right)^s,\quad \theta\ll 1 \tag{2.2-25}$$

(2) 大角散射

某些情况下，在计算弹性能量损失时，大角散射也是很重要

的。经过微小修正，把描述小角散射的(2.2-21)式外推到大角散射的情况，保留 ε_L 和 θ 组合成单变量的特点。在大角散射时

$$\frac{\theta}{2} \to \sin\frac{\theta}{2}$$
$$p^2 \to p^2 + p_0^2$$

于是有

$$\varepsilon_L \cdot \sin\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} g\left(\frac{\sqrt{p^2+p_0^2}}{a}\right) \Big/ \left(\frac{\sqrt{p^2+p_0^2}}{a}\right) \qquad (2.2\text{-}26)$$

并从(2.2-25)式得到

$$\varepsilon_L \cdot \sin\frac{\theta}{2} = \frac{1}{2} k_s \gamma_s \left(\frac{a^2}{p^2+p_0^2}\right)^{s/2} \qquad (2.2\text{-}27)$$

p_0 为常数，它是由 $\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = 1$ 对应 $p = 0$ 的条件来确定的，即

$$p_0 = \left(\frac{k_s \cdot \gamma_s}{2} b a^{s-1}\right)^{1/s} \qquad (2.2\text{-}28)$$

把(2.2-28)式代入(2.2-27)式，得

$$\sin\frac{\theta}{2} = \frac{1}{\left[\left(\frac{p}{p_0}\right)^2 + 1\right]^{s/2}} \qquad (2.2\text{-}29)$$

当 $s = 1$ 时，就得到(1.3-8c)式。

由(2.2-25)、(2.2-14)和(2.1-8)式，可以推出微分散射截面

$$\begin{aligned} d\sigma &= \pi d(p^2) = \pi a^2 d\left(\frac{k_s\gamma_s}{\varepsilon_L \cdot \theta}\right)^{2/s} \\ &= \pi a^2 \left(\frac{k_s\gamma_s b}{a}\right)^{2/s} d\left(\frac{1}{\theta^{2/s}}\right) \\ &= \pi(k_s^2\gamma_s^2 b^2 a^{2s-2})^{1/s} d\left(\frac{T_{\max}}{4T}\right)^{1/s} \\ &= -\pi\left(\frac{b^2}{4} a^{2s-2} k_s \gamma_s^2 T_{\max}\right)^{1/s} \frac{1}{s} \frac{dT}{T^{1+1/s}} \end{aligned} \qquad (2.2\text{-}30)$$

当 $s = 1$ 时，$\frac{d\sigma}{dT} \sim \frac{1}{T^2}$，这是汤姆孙 (Thomson) 截面表达式；当 $s = 2$ 时，$\frac{d\sigma}{dT}$ 是玻尔关于散射截面的分析形式[2]。同样，根据(2.2-27)式，截面 $d\sigma = \pi d(p^2 + p_0^2)$ 可以表示为一个变量 $\varepsilon_L \cdot$

$\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$的函数，但我们将采用下面要讲到的更为方便的表达形式。

(3) 约化散射截面

下面我们来求微分散射截面和约化变量

$$t \equiv \varepsilon_L^2 \cdot \sin^2\frac{\theta}{2} \qquad (2.2\text{-}31)$$

之间的关系。t 正比于入射粒子能量 E 和能量转移 T, dt 则正比于 dT 和微分立体角 $d\Omega = 2\pi\sin\theta d\theta$, 即

$$dt = \frac{M_2}{M_1}\left(\frac{2Z_1Z_2e^2}{a}\right)^{-2}E \cdot dT \qquad (2.2\text{-}32)$$

$$dt = \frac{\varepsilon_L^2}{4\pi}d\Omega$$

通过 (2.2-27)、(2.2-31) 和 (2.2-32) 式，由 $d\sigma = \pi d(p^2 + p_0^2)$ 得到

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\pi a^2\left(\frac{\gamma_s k_s}{2}\right)^{2/s}\frac{1}{s}\frac{1}{t^{1+V}} \qquad (2.2\text{-}33)$$

取 $s = 2$ 作参考是有用的,因为第一,它相当于距离 r 接近 a 时的实际屏蔽;第二，若势函数采用 r^{-2} 的形式，就能用解析方法得到许多物理量。这样，只要屏蔽函数 u 等于托马斯-费米屏蔽函数，就可以把散射截面对 $s = 2$ 的情况“归一化”,于是

$$\frac{d\sigma}{dt} = -\pi a^2\frac{f(t^{\frac{1}{2}})}{2t^{3/2}}, \qquad (2.2\text{-}34)$$

$$f(t^{1/2}) = \frac{2}{s}\left(\frac{\gamma_s k_s}{2}\right)^{2/s}(t^{1/2})^{1-2/s} \qquad (2.2\text{-}35)$$

分母中取 2 是习惯做法。图 2.2-2 示出函数 $f(t^{\frac{1}{2}})$ 的数值解. 其行为就是 (2.2-34) 式和 (2.2-33) 式所预期的. $s = 1$ 相当于非屏蔽库仑势，即令 $s = k_s = \gamma_s = 1$, (2.2-35) 式的 $f(t^{\frac{1}{2}})$ 趋于 $f_{卢瑟福}$:

$$f_{卢瑟福}(t^{\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2t^{1/2}} \qquad (2.2\text{-}36)$$

随着散射角 θ 的减少，偏转主要部分发生在 s 值增加的区域。于

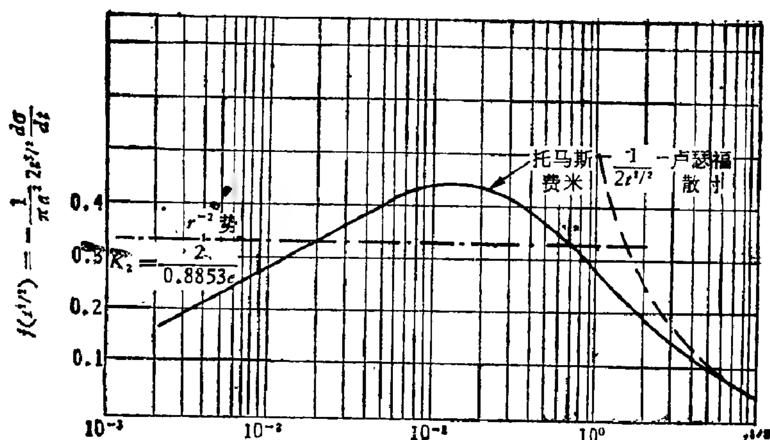


图 2.2-2 用托马斯-费米势计算的约化微分截面，虚线为卢瑟福散射，链线(水平线)为指数势

是，随着 $t^{\frac{1}{2}}$ 减小函数 $f(t^{\frac{1}{2}})$ 穿过一个极大值，相当于 $s=2$。而 $t^{\frac{1}{2}}$ 进一步减小，则相当于 $s>2$，$f(t^{\frac{1}{2}})$ 也逐渐减小。图 2.2-2 中的指数势 ($s=2$) 的常数 K_2 是由距离 $r=a_0Z^{-1/3}$ 的玻尔势 $V(r)=\frac{Z_1Z_2e^2}{r}\exp\left[-\frac{r}{a_0\cdot Z^{-1/3}}\right]$ 确定的，其中 $Z^{2/3}=Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3}$。

三 弹性能量损失

计算出约化的弹性散射截面后，就可以计算核碰撞过程的平均能量损失。由能量转移 (2.1-6) 式

$$T=\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}E\cdot\sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

和截面 (2.2-34) 式以及 (2.2-32) 式和 (2.2-14) 式，得到核碰撞中的阻止本领

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n=N\int_0^{T_{\max}}d\sigma\cdot T=N\pi a^2\int_0^{\varepsilon_L^2}\frac{dt}{2t^{3/2}}f(t^{\frac{1}{2}})$$

$$\times\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}E\frac{t}{\varepsilon_L^2}=\frac{E}{\varepsilon_L}$$

$$\times\left[4\pi a^2N\frac{M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}\right]\frac{1}{\varepsilon_L}\int_0^{\varepsilon_L}d\xi(\xi) \quad (2.2\text{-}37)$$

为方便起见，用约化长度 ρ 来表示入射粒子在路径上的位置 x

$$\rho\equiv x4\pi a^2N^2\frac{M_1M_2}{(M_1+M_2)^2} \quad (2.2\text{-}38)$$

于是，在 ε_L-ρ 单位中，阻止本领为

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_n=\frac{E}{\varepsilon_L}\cdot\frac{\rho}{x}\left(-\frac{d\varepsilon_L}{d\rho}\right)_n \quad (2.2\text{-}39)$$

$$\left(-\frac{d\varepsilon_L}{dx}\right)_n=\frac{1}{\varepsilon_L}\int_0^{\varepsilon_L}d\xi f(\xi) \quad (2.2\text{-}40)$$

图 2.2-3 为约化的弹性阻止本领 $\left(-\frac{d\varepsilon_L}{d\rho}\right)_n$. 曲线的主要特征可以通过函数 $f(\xi)$ 推出。由 (2.2-33) 和 (2.2-34) 式得到

$$f(\xi)\sim\frac{1}{\xi^{2/s-1}} \quad (2.2\text{-}41)$$

当 $s=2$ 时，阻止能力与能量无关且可得到高 ε_L 值时的特征，即 $\left(-\frac{d\varepsilon_L}{d\rho}\right)\sim\frac{\log\varepsilon_L}{\varepsilon_L}$. 例如在 $\varepsilon_L\gtrsim10$ 时，可以用公式

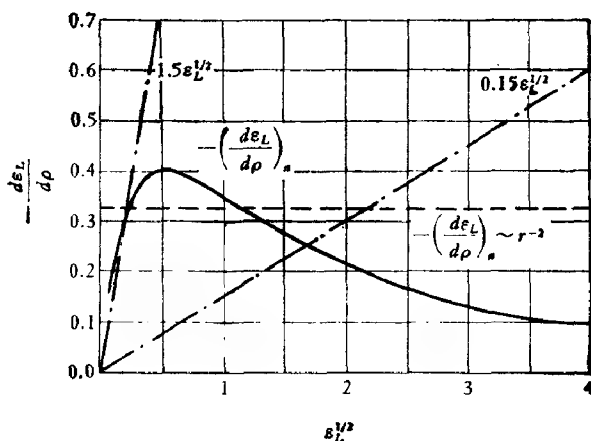


图 2.2-3　用约化单位表示的核和电子阻止能力[19]. 实线是托马斯-费米模型核阻止，链线是电子阻止能力

$$\left(-\frac{d\varepsilon_L}{d\rho}\right)_n = \frac{1}{2\varepsilon_L}\log(1.29\varepsilon_L) \qquad (2.2\text{-}42)$$

图 2.2-3 表示一些电子激发的平均质量损失，但是完整地描述非弹性能量损失，单有参数 ε_L 和 ρ 是不够的. 在下一节中我们再对这方面做详细讨论. 一般来说，高能时电子阻止是主要的，低能时核阻止是主要的，且公式 $\left(-\frac{d\varepsilon_L}{d\rho}\right)_e = K_2\varepsilon_L^{1/2}$ 的比例常数 K_2 随 Z_1 和 Z_2 变化很大。

后来，开尔比特尔 (Kalbitzer)[20] 等人提出了一个简单的普适公式

$$\left(\frac{d\varepsilon_L}{d\rho}\right)_n = \frac{1.7\varepsilon_L^{1/2}\ln(\varepsilon_L + e)}{1 + 6.8\varepsilon_L + 3.4\varepsilon_L^{3/2}} \qquad (2.2\text{-}43)$$

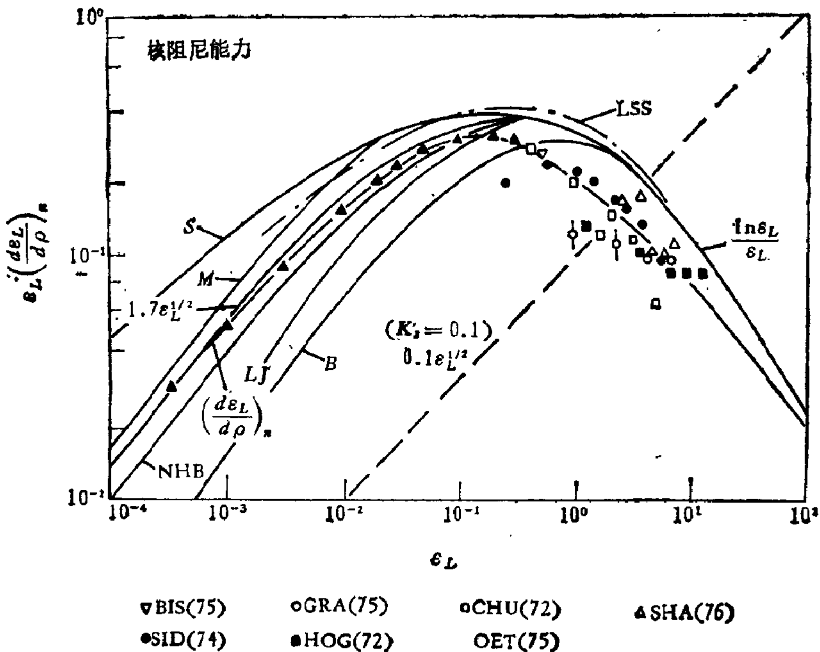


图 2.2-4 在 LSS 单位中核阻止能力与能量的关系[20]. 点为实验数据；理论曲线是根据不同的势得到的，见 S. Sommerfeld; M. Molière; LJ, Lenz-Jansen, B. Bohr 以及 LSS 理论.

来拟合核阻止能力的实验数据(注意，这里的 $e = 2.718$ 是自然对数的底)。在 $10^{-4} \leqslant \varepsilon_L \leqslant 10^2$ 这样宽的范围内所给出的值比 LSS 理论低得多。图 2.2-4 就是开尔比特尔研究核阻止能力的结果（以 LSS 单位）。点是实验数据，曲线是核阻止能力的各种理论结果，虚线是 $k = 0.1$ 的电子阻止能力．由（2.2-43）式拟合实验数据的曲线同威耳孙（Wilson)、哈格马克（Haggmark）及比尔赛克 (Biersack)[21] 的理论计算（见图 2.2-4 的 WHB 曲线）符合得很好。

§2.3 电子阻止和迁移截面

入射粒子所受到靶原子的电子阻止是由于靶原子内部自由度激发而产生的．对于低电荷高速入射粒子，电子阻止过程是主要的，即使在速度比较低时，电子阻止也仍然是主要的(见图 2.1-1)．我们先讨论低速下的电子能量损失，但这里所采用的方法不仅仅限于低速情况．有关高速下电子能量损失的量子力学处理（玻恩近似)放在下一节中讨论。

一 电子气体中的阻止能力

若一个动量为 $\mathbf{P} = M_1\mathbf{v}$ 的离子穿过一个介质，其电子气体的密度为 n，则在距离 dx 中的能量损失 $(-dE)$ 为

$$(-dE) = -d\left(\frac{\mathbf{P}^2}{2M_1}\right) = -\mathbf{v}\cdot d\mathbf{P} = v(-dP_{/\!/}) \quad (2.3\text{-}1)$$

$(-dP_{/\!/})$ 是 $\mathbf{v}$ 方向的动量损失．这个简单的关系也可以写成

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{dx}{dt}\left(-\frac{dP_{/\!/}}{dx}\right) = \left(-\frac{dP_{/\!/}}{dt}\right) \qquad (2.3\text{-}2)$$

在所有的惯性系统中，动量的变化是相同的．因此，我们可以取实验室坐标系或任何别的惯性系来计算由离子散射而引起电子速度的变化．由于离子速度的变化是电子速度变化的 $\frac{m}{M_1}$ 倍，因此把

离子静止坐标系看成是惯性系来求电子速度的变化是特别方便的，也就是从离子静止坐标系来考察电子在离子周围固定的屏蔽库仑势中散射时所传给这个电子的动量.

根据托马斯-费米模型，同时把靶中的电子看成是一定密度 n_e 的电子气体. 首先考虑它们的费米速度 v_F 同入射粒子速度比较起来小到可以忽略的情况.

(1) $v \gg v_F$

在离子静止坐标系中，靠近散射区域的每个电子都有一个动量 $-m\mathbf{v}$，$\mathbf{v}$ 是实验室坐标系中离子速度. 如果一个电子被散射了 θ 角度，那么，在 $-\mathbf{v}$ 方向传给离子的动量等于 $mv(1-\cos\theta)$. 因为进来电子的通量是 $n_e v$，所以我们得到单位时间的总动量转移为

$$-\frac{dP_{/\!/}}{dt} = nv\int_0^{\pi} (d\theta 2\pi \sin\theta\sigma(v,\theta))mv(1-\cos\theta) \tag{2.3-3}$$

其中 $\sigma(\theta)$ 表示微分散射截面. 而

$$\sigma_{tr}(v) = \int_0^{\pi}(1-\cos\theta)\sigma(\theta)2\pi\sin\theta d\theta \tag{2.3-4}$$

是迁移截面. 通过方程 (2.3-2) 和 (2.3-3)，可以得出阻止能力正比于迁移截面

$$-\frac{dE}{dx} = n_e m v\sigma_{tr}(v) \tag{2.3-5}$$

m 是电子质量.

在相反的情况下，即 $v \ll v_F$，此时必须考虑电子的初速度分布，而这个分布比较复杂，详细计算又有些冗长，所以我们只给出阻止能力公式的主要特征.

(2) $v \ll v_F$

在离子静止坐标系中，电子速度分布由图 2.3-1 的影线部分表示，原点在 0 点. 费米速度 v_F 由下式给出:

$$v_F^3 \equiv \frac{(\hbar K_F)^3}{m^3} = \left(\frac{\hbar}{m}\right)^3 \cdot 3\pi^2 \cdot n_e \tag{2.3-6}$$

由于电子经过势散射并不改变其速度的绝对值，根据泡利（Pauli）原理仅允许图中影线部分的电子散射到大球之外的态上去，因此，只有一部分电子 ν_e 能参加这种散射过程，由（2.3-6）式估计 ν_e 的数量为

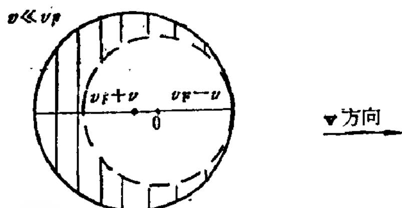


图 2.3-1 离子静止坐标系中的电子速度分布（$v \ll v_F$）

$$\nu_e \sim \frac{v_F^2 v}{v_F^3} = \frac{v}{v_F}, \quad v \ll v_F \tag{2.3-7}$$

因此，所有能被散射的电子运动速度约为 v_F，其通量为

$$f = n_e \nu_e v_F \sim n_e v \tag{2.3-8}$$

在一**v** 方向散射到角度 θ 的平均动量转移是 $mv_F(1-\cos\theta)$，因此，我们可以得到

$$-\frac{dE}{dx} = n_e v m v_F \sigma_{tr}(v_F) \tag{2.3-9}$$

现在推导（2.3-9）式．在离子静止坐标系中，观察一个实验室坐标系里速度为 $\mathbf{v}_i$ 的电子以速度

$$\mathbf{w}_i = \mathbf{v}_i - \mathbf{v} \tag{2.3-10}$$

接近散射中心．散射到 θ 角度后，电子的速度为 $\mathbf{w}_i$，$|\mathbf{w}_i'| = |\mathbf{w}_i|$．密度为 n_i 速度为 $\mathbf{w}_i$ 的电子散射到角度为 θ 的立体角元 $d\Omega$ 内，使离子得到投影动量转移 $dP_I^{(i)}$

$$-dP_I^{(i)} = (n_i w_i dt)\sigma(\theta, w_i)d\Omega(\mathbf{w}_i' - \mathbf{w}_i)\frac{\mathbf{v}}{v} m \tag{2.3-11}$$

这里假定散射遵从泡利原理．但是，为泡利原理所“禁止”的项全是成对出现的，因而彼此相消．例如，从 $\mathbf{w}_i$ 到 $\mathbf{w}_i'$ 的散射和从 $\mathbf{w}_i'$ 到 $\mathbf{w}_i$ 的散射，其动量转移必然是大小相等方向相反，而从速度元 $d^3\mathbf{w}$ 到 $d^3\mathbf{w}'$ 散射事件数一定等于由 $d^3\mathbf{w}'$ 到 $d^3\mathbf{w}$ 的散射数目．

由对称性原理，在（2.3-11）式中作如下替换

$$(\mathbf{w}_i' - \mathbf{w}_i)\cdot\frac{\mathbf{v}}{v} \to w_i(\cos\theta - 1)\frac{\mathbf{w}_i}{w_i}\cdot\frac{\mathbf{v}}{v} \quad (2.3\text{-}12)$$

如图 2.3-2 所示，$\mathbf{v}$ 可以分解成平行和垂直于 $\mathbf{w}_i$ 方向的两个分量，

$$\mathbf{v} = \alpha\mathbf{w}_i + \mathbf{v}_\perp,\ \alpha = \frac{\mathbf{v}\cdot\mathbf{w}_i}{w_i^2} \quad (2.3\text{-}13)$$

固定 θ，$\mathbf{w}_i$ 的尖端可以画一个圆，$(\mathbf{w}_i' - \mathbf{w}_i)\cdot\mathbf{v}_\perp$ 的贡献之和为零．结果，(2.3-11) 式只包括

$$(\mathbf{w}_i' - \mathbf{w}_i)\cdot\frac{d\mathbf{w}_i}{v} = -w_i(1-\cos\theta)\frac{w_i}{v} \times \frac{\mathbf{v}\cdot\mathbf{w}_i}{w_i^2} = -w_i(1-\cos\theta)\frac{\mathbf{v}\cdot\mathbf{w}_i}{vw_i} \quad (2.3\text{-}14)$$

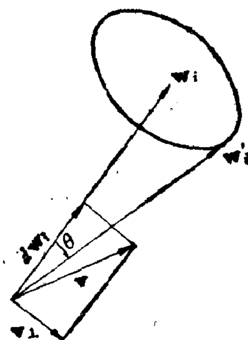


图 2.3-2　速度分量的空间表示

对于初速度 $\mathbf{w}_i$ 的粒子，(2.3-11) 式应对散射角 θ 的所有可能值取和，

$$-\frac{dP_{\parallel}^{(i)}}{dt}\bigg|_{总} = -n_i w_i \frac{\mathbf{w}_i\cdot\mathbf{v}}{v} m \times \int_0^\pi (1-\cos\theta)\sigma(\theta, w_i)2\pi\sin\theta d\theta \quad (2.3\text{-}15)$$

引入 (2.3-4) 式迁移截面，则有

$$-\frac{dP_{\parallel}^{(i)}}{dt}\bigg|_{总} = n_i m w_i \sigma_{tr}(w_i)(v - v_i\cos(v_i, \mathbf{v})) \quad (2.3\text{-}16)$$

"i"系指 $\mathbf{w}$ 为给定初值的粒子．按照 (2.3-10) 式，一个电子可等效地用实验室坐标系的相应速度 $\mathbf{v}_e$ 来表征．于是可作如下替换

$$n_i \to \frac{n}{\frac{4\pi}{3}v_F^3} v_e^2 dv_e 2\pi d\cos(\mathbf{v}_e, \mathbf{v}) \quad (2.3\text{-}17)$$

令 $\zeta = \cos(\mathbf{v}_e, \mathbf{v})$，结果阻止能力 $\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \left(-\frac{dP_{\parallel}}{dt}\right)$ 为

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)=m\frac{n}{\frac{4\pi}{3}v_F^3}2\pi\int_0^{v_F}dv_e v_e^2\int_{-1}^{1}d\zeta(v^2+v_e^2$$

$$-2vv_e\zeta)^{1/2}(v-\zeta v_e)\sigma_{tr}(\sqrt{v^2+v_e^2-2vv_e\zeta}) \qquad (2.3\text{-}18)$$

$v=0$ 时 $\frac{dE}{dx}=0$ 且 v 很小，将 (2.3-19) 式右边对 v 展开，舍去 v 的高阶项即得

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)=\frac{3n}{v_F^3}m\int_0^{v_F}dv_e v_e^2\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}d\zeta(v_e-v\zeta)(v-v_e\zeta)$$

$$\cdot\left[\sigma_{tr}(v_e)-\frac{d\sigma_{tr}(v_e)}{dv_e}v\zeta\right]$$

含有 ζ 奇幂项对积分无贡献，故仅取 ζ 的偶幂项，得到

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)=\frac{3n}{v_F^3}m\int_0^{v_F}dv_e v_e^2\int_0^1 d\zeta\left[vv_e\sigma_{tr}(v_e)\right.$$

$$\left.+vv_e^2\frac{d\sigma_{tr}(v_e)}{dv_e}\zeta^2+vv_e\sigma_{tr}(v_e)\zeta^2\right]$$

$$=\frac{3n}{v_F^3}mv\left[\int_0^{v_F}dv_e\frac{4}{3}v_e^3\sigma_{tr}(v_e)\right.$$

$$\left.+\frac{1}{3}\int_0^{v_F}dv_e v_e^4\frac{d\sigma_{tr}(v_e)}{dv_e}\right] \qquad (2.3\text{-}19)$$

对 (2.3-19) 式右边第二项作部分积分后有一项和右边第一项相消，剩下的就得 (2.3-9) 式

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)=nmv_F\sigma_{tr}(v_F)\cdot v,\quad v\to 0 \qquad (2.3\text{-}9)$$

上述从图 2.3-1 推出 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)$ 的方法也适用于 $v\gg v_F$ 的情况，只是步骤简单多了．用 $\mathbf{w}\simeq\mathbf{v}$ 代入 (2.3-16) 式，有

$$-\frac{dP_{\parallel}^{(i)}}{dt}=n_i mv\sigma_{tr}(v)\cdot v,\quad v\gg v_F,$$

通过此式就可以直接得出 (2.3-5) 式．但是，两者的迁移截面是相当不同的．

方程 (2.3-9) 最主要的内容是阻止能力与入射粒子速度成比

例。当我们对构成原子的电子气体作托马斯-费米平均时，上述特征必然要影响到靶原子。但是，求 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = Kv$ 中的比例常数 K 往往是复杂的问题。对于电子气体需要求在费米速度下的迁移截面。求 $\sigma_{tr}(v_F)$ 就需要知道微分散射截面 $\sigma(v_F, \theta)$，而要确定这个函数就必须了解对电子散射起作用的离子周围的场。因此问题还是归结为要建立一个散射势的表达式。

二 散射势

假定一个正电荷 Z_1e 停在电子气中，点电荷屏蔽作用可用托马斯-费米原子的方法来讨论。在平衡条件下，大多数运动电子的能量与位置无关，而且能量的确定可以选取离 Z_1e 足够远处，以致这个电荷存在的影响可以忽略。这种势 $V(r)$ 和局部费米动量 $P_F(r)$ 的关系通过方程

$$\frac{P_F^2(r)}{2m} - eV(r) = \frac{P_F^2}{2m} \tag{2.3-20}$$

联系起来。式中 $P_F = \hbar k_F$ 是未扰动气体的费米动量，$k_F^3 = 3\pi^2 n_e$。

为了保证电荷中性，假定电子在均匀带正电的本底中运动，于是泊松方程把 $V(r)$ 同实际密度 $n_e(r)$ 和未扰动密度 n_e 之差联系起来

$$\Delta V(r) = -4\pi(-e)(n_e(r) - n_e) - 4\pi Z_1 e\delta(\mathbf{r}). \tag{2.3-21}$$

我们准备在两个相反的极限情形下求出 $V(r)$:

(i) 与正电荷周围的电子密度 $n_e(r)$ 相比，电子气体密度小。这时在作用区域内，$n_e(r) \gg n_e$。于是可在 (2.3-20) 和 (2.3-21) 式中引入一近似 $P_F \simeq 0$ 和 $n_e(r) - n_e \simeq n_e(r)$。这样，在一级近似下，电子密度和势看成好像在孤立的托马斯-费米原子中的电子密度和势一样。

(ii) 电荷 Z_1e 只使电子气体的初始密度有一个很弱的扰动，也即是，$|n_e(r) - n_e|/n_e \ll 1$。这时我们可以引进近似条件

$$n_e(r) - n_e = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}[P_F^3(r) - P_F^3]$$

$$= \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}[P_F^2 + 2meV(r)^{3/2} - P_F^3]$$

$$\simeq \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\frac{3}{2}P_F 2meV(r) \qquad (2.3\text{-}22)$$

用 n 表示 P_F，并把 (2.3-22) 式代入 (2.3-16) 式

$$\Delta V(r) = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}rV(r) = \left(4\pi e\ \frac{me}{\pi^2\hbar^3}\hbar(3\pi^2)^{1/3}n_e^{1/3}\right)V(r)$$

$$(2.3\text{-}23)$$

$$V(r)\xrightarrow[r\to 0]{}\frac{Z_1 e}{r}$$

在接近点电荷时，(2.3-22) 式就不能成立；但在 (2.3-23) 式中，即使 $r\to 0$ 时 $V(r)$ 也可保证没有什么问题。由

$$V(r) \equiv \frac{Z_1 e}{r}U(r) \qquad (2.3\text{-}24)$$

代入方程 (2.3-20)

$$U''(r) = \frac{1}{a^2}U(r) \qquad (2.3\text{-}25)$$

$$U(0) = 1$$

其中

$$\frac{1}{a^2} \equiv \frac{12\pi}{(2\pi^2)^{2/3}}\frac{n^{1/3}}{a_0} = \frac{4}{\pi}\frac{k_F}{a_0} \qquad (2.3\text{-}26)$$

方程 (2.3-25) 的解

$$U(r) = e^{-r/a} \qquad (2.3\text{-}27)$$

因此，在 $|n_e(r) - n_e|/n_e \ll 1$ 时，我们得到指数屏蔽的库仑势。

屏蔽函数在低密度极限 (i) 和高密度极限 (ii) 是有些不同的。但是，(2.3-26) 式的高密度屏蔽长度在电子气体密度 n_e 和托马斯-费米密度 $Z_1/(a_0 Z_1^{-1/3})^3$ 相当时与托马斯-费米屏蔽长度 $a_{T.F.} \simeq a_0 Z_1^{-1/3}$ 的数量级相同。因此，两个渐近的密度极限在密度为 $n_e \sim \frac{Z_1^2}{a_0^3}$ 处连结起来。

三 迁移截面

求迁移截面 $\sigma(v_F)$ 最简单的情况是所谓"纯扰动极限"，也就是

(i) 屏蔽函数由高密度公式 (2.3-27) 给出，也即满足

$$Z_1^{2/3} v_B < v_F$$

(ii) 在玻恩 (Born) 近似条件下决定散射截面，即满足

$$\kappa_c = \frac{2Z_1 v_0}{v_F} < 1, \quad v_B = \frac{e^2}{\hbar} \tag{2.3-28}$$

(1) $2Z_1 v_B < v_F$

玻恩近似下，动量 mv_F 的粒子在指数屏蔽的库仑势 $\frac{Z_1 e}{r} e^{-r/a}$ 中的散射截面是

$$\sigma(\theta) = \frac{Z_1^2 e^4}{4m^2 v_F^4} \frac{1}{\left[\sin^2\frac{\theta}{2} + \chi^2\right]^2} \tag{2.3-29}$$

其中
$$\chi^2 \equiv \left(\frac{\lambda_F}{2a}\right)^2 = \frac{v_0}{\pi v_F} \tag{2.3-30}$$

当两个粒子之间的静电相互作用势能与其动能相比可以忽略时，自由电子气体假设才是符合实际的，这时高密度区域相当于 $\chi^2 \lesssim 1$。

相应于 (2.3-26) 式的迁移截面的分析形式有

$$\sigma_{tr}(v_F) = \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{m v_F^4}\left[\log\frac{1+\chi^2}{\chi^2} - \frac{1}{1+\chi^2}\right] \tag{2.3-31}$$

再由 (2.3-9) 式得到相应的阻止能力

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right) = \frac{4}{3\pi} Z_1^2 \frac{v}{v_0} \frac{e^2}{a_0^2} c_1(\chi),$$

$$c_1(\chi) = \frac{1}{2}\left[\log\frac{1+\chi^2}{\chi^2} - \frac{1}{1+\chi^2}\right], \quad \chi = \frac{v_0}{\pi v_F} \tag{2.3-32}$$

在这个极限下，阻止能力似乎与电子密度无关。实际上，当 $\chi^2 \ll 1$

时，$c_1(\chi) \simeq \log\left(\frac{1}{\chi}\right)$，其中 χ 正比 $n^{-\frac{1}{6}}$. 如果把 (2.3-32) 式同自由电子气体的电介质描述所得到的结果相比较就可以检验我们的计算结果. 在 χ^2 的零级近似下，两个结果完全一样. 对 χ^2 的有限值，表 2.3-1 给出两者计算的结果.

表 2.3-1 玻恩近似和电介质描述的迁移截面的比较

χ^2	10^{-2}	10^{-1}
$c_1(\chi)_{玻恩}$	1.813	0.744
$c_1(\chi)_{电介质}$	1.823	0.787

在微扰情况下，我们还可以确定入射粒子速度较低时与速度成比例的阻止能力的上限。实际上，通过介电描述发现，低速度时的渐近公式对速度一直到 v 接近 v_F 时的严格解提供了一个很好的近似。

关于入射粒子速度高时所受的电子阻止能力 (2.3-5) 式和速度低时的 (2.3-9) 式之间的联系也很容易在微扰极限中得到阐明。

(2) $v > 2Z_1v_B$

在入射粒子速度高时，(2.3-23) 式的静态屏蔽长度可用较大的绝热截止距离 (adiabatic cutoff distance) $\frac{v}{\omega_0}$ 来代替，其 $\omega_0 = (4\pi e^2 n/m)^{\frac{1}{2}}$ 是电子气体的等离子体频率。因此，在 (2.3-29) 式中作 $v_F \to v$ 和 $\chi \to \frac{\hbar}{2mv}\Big/\left(\frac{v}{\omega_0}\right) = \hbar\omega_0/2mv^2$ 替换即可得到有关的散射截面。于是，在高密度极限下，按照 (2.3-5) 式和 (2.3-31) 就得到

$$-\frac{dE}{dx} = n_e mv^2 \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{m^2 v^4} \log\left(\frac{2mv^2}{\hbar\omega_0}\right)$$

$$= \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} n_e \log\left(\frac{2mv^2}{\hbar\omega_0}\right) \qquad (2.3-33)$$

这就是贝特（Bethe）公式。

(3) 低速重离子[22]

这种情况常常出现在低密度极限 $Z_1^{2/3}v_B > v_F$ 的情形，此时散射势是托马斯-费米原子势。虽然与电子速度 $\sim v_F$ 相对应的玻尔 κ_e 略大于 1，即 $\kappa_e = \frac{2Z_1v_0}{v_F} > 1$，但还不是大到能用经典方法求屏蔽库仑势所得到的小角散射部分。实际上，从严格的量子计算（数值计算）发现，在电子速度一定时，迁移截面随 Z_1 振荡。这种与单调平滑曲线不同的地方就是量子特性的表现。要观察这个特性，就要用所谓相移 η_l 来表示迁移截面。一个电子能量为 $\frac{(\hbar k)^2}{2m}$ 角动量 $\hbar l$ 的径向薛定谔（Schrödinger）方程是

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}V(r)-k^2\right](rR_l(r))=0 \tag{2.3-34}$$

这个方程物理解的渐近行为是

$$R_l(r)\xrightarrow[r\to\infty]{}\frac{1}{kr}\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\eta_l\right) \tag{2.3-35}$$

这同不存在场 $V(r)\equiv 0$ 的表示式一样，只是这时多了一个相移 η_l，η_l 可以从 (2.3-34) 式的数值解得到。

用相移差来表示迁移截面

$$\sigma_{tr}=\frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(l+1)\sin^2(\eta_l-\eta_{l+1}) \tag{2.3-36}$$

在低能下只有与少数几个最低角动量相对应的相移不为零，因为 l 值高时角动量位垒 $l(l+1)/r^2$ 会阻止粒子穿到势不为零的区域。通常相移随 Z_1 增加而单调地增加，当 Z_1 经过元素周期表一个周期时，相移的值改变一个 π。所对应的相移差几乎与 Z_1 无关，从而使 Z_1 独立地对 σ_{tr} 作贡献。然而，对于一个给定的 l 值，$l=l_0$，就会偏离这个简单的图象而出现例外，即随 Z_1 增加的势第一次增强到有可能容纳下 $l=l_0$ 的一个束缚态。在势场强的区域

内，相移 η_{l_0} 随 π 增加很快，但由于 η_{l_0+1} 基本上为零，致使 σ_{tr} 随 Z_1 的变化呈现振荡特点。

图 2.3-3 绘出用托马斯-费米势计算的结果[22]. 由于理论计算时需对靶电子密度求平均，所以要把相应的阻止能力同实验结果

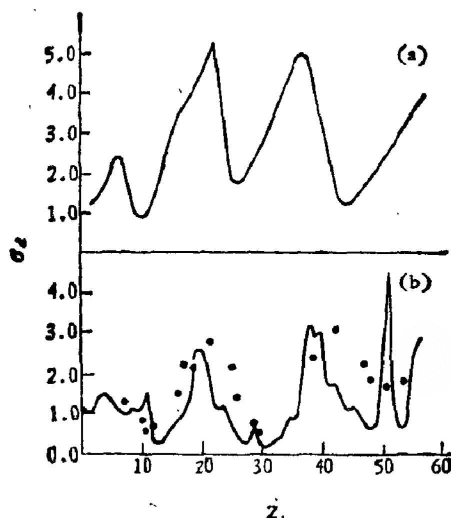


图 2.3-3 (a) 在 k=0.75 时用托马斯-费米势得到动量转移截面 σ_d 和原子序数 Z_1 的关系；(b) 曲线是在k=0.75 用壳模型势得到的动量转移截面[22]. 圆点是包梯格 (Bøttiger) 和巴逊 (Bason) (1970)[23] 的实验阻止能力，$\sigma_d \equiv \sigma_{tr}$，以 a_0^2 为单位，k 以 a_0^{-1} 为单位[22]

进行定量比较有些复杂. 仅管如此，我们还是观察到极大和极小位置对电子密度和其费米速度较为不灵敏，而获得极值的 Z_1 值同实验值符合很好，因为在这些极值位置观察到阻止能力的极大和极小。

四 低速下电子阻止截面

通过上述讨论，我们知道从随机方向穿进物质时，内壳电子对阻止能力的贡献较小. 而且，在速度很低时，中性化几率大，以致入射粒子和周围电子之间的碰撞在离子运动的坐标系内几乎是弹性的。因此，能量损失正比于入射粒子的速度，如 (2.3-9) 式。描

述低能下非弹性能量损失的 LSS 理论是根据自由靶电子在屏蔽点电荷静电场中散射的模型，而费尔索夫（Firsov）则考虑入射粒子和靶原子在穿过电子云时的动量交换。

(1) 林哈德-沙尔夫表达式[7]

林哈德-沙尔夫（Scharff）利用原子的托马斯-费米模型和各种阻止系统之间的相似性，试图建立满足所有可能的离子-靶组合的表达式。无疑这是相当困难的，因为这样做需把许多很不相同的情况包含在一个公式内。例如，一个离子周围的有效散射势，有时是托马斯-费米模型，其屏蔽电荷是由 Z_1 确定的；有时是高密度型的，屏蔽是由电子气体确定的[如式(2.3-26)]。又如，求散射截面所采用的近似中，有时用玻恩近似，有时可用经典方法。如果情况再复杂，还需要用更一般的相移分析，得到在平滑曲线上叠加的波动，如图 2.3-3。尽管如此，如果对这些孤立的波动求平均，采用下列的林哈德-沙尔夫表达式同实验符合还是较好的。

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e=8\pi e^2a_0\frac{Z_1^{7/6}Z_2}{(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3})^{3/2}}\frac{v}{v_0},\quad v<v_0Z_1^{2/3} \tag{2.3-37}$$

表 2.3-2 LSS 转换因子

靶	离子	E/ε_L(千电子伏)	x/ρ(Å)	K_e
Si	H	1.163	1480	2.08
	He	2.674	492	0.45
	B	8.850	313	0.24
	As	209	590	0.12
	Sb	515	928	0.11
Ge	H	3.32	6730	5.47
	As	298	668	0.16
	Sb	656	835	0.14
Au	H	10.75	23540	15.1
	As	592	883	0.46
	Sb	1136	837	0.22

用 $\varepsilon_L-\rho$ 单位表示，上式为

$$\left(-\frac{d\varepsilon_L}{d\rho}\right)_e = K_2\varepsilon_L^{\frac{1}{2}}$$

式中

$$K_2 = \frac{0.0793Z_1^{2/3}Z_1^{1/2}(A_1+A_2)^{3/2}}{(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3})^{3/4}A_1^{3/2}A_2^{3/2}} \qquad (2.3\text{-}38)$$

A_1 和 A_2 分别表示入射粒子和靶核的质量数. 对 $Z_1 \gtrsim Z_2$，常数 K 在 0.1 到 0.2 之间；当 $Z_1 \ll Z_2$ 时，K 会大于 1. 表 2.3-2 给出几个组合系统的 E/ε_L，x/ρ 和 K 的值.

(2) 费尔索夫模型[10]

费尔索夫 1959 年提出电子阻止作用模型与上述的略有不同. 其优点在于得出与核阻止类似的形式，还便于进一步考虑 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ 随 Z_1 或 Z_2 周期性振荡效应. 其物理思想是把入射粒子和靶原子看成一个准分子. 当入射粒子以低速靠近靶原子并试图形成一个准分子时，两者发生电子交换. 由入射粒子转移到靶原子中去的电子，要失去动量和能量，而由靶原子转移到离子中的电子会得到动量和能量. 这些能量交换均以入射粒子能量损失为代价. 因此，碰撞中的总能量损失是

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \int_0^\infty T_e(p)2\pi p dp$$

$$= \frac{2\pi Z_1^2 Z_2 e^4}{mv^2}\ln\frac{T_{\max}}{T_{\min}} \qquad (2.3\text{-}39)$$

当入射离子由无穷远处逐渐靠近靶原子而后离开，费尔索夫得到的能量转移可近似表示为

$$T = \frac{4.3\times10^{-8}(Z_1+Z_2)^{5/3}}{[1+3.1\times10^7(Z_1+Z_2)^{1/3}p]^5}v \qquad (2.3\text{-}40)$$

T 的单位是电子伏特；v 是入射粒子速度，单位是厘米/秒；p 是碰撞参数，单位是厘米. (2.3-40) 式只适用于入射粒子速度 v 小于离子和靶原子的外围电子轨道速度. 并且，假定了离子和靶原子

中所有电子都参加交换，所以，$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ 随 Z_1 单调增加。如果考虑电子在原子周期性排列所带来的 Z_1 对电子阻止有周期性的影响。也即是，最紧束缚电子的屏蔽效应，来修正费尔索夫公式[24,25]。那么，也可以得到电子阻止能力随 Z_1 的振荡特性。图 2.3-4 给出入射粒子速度 $v=0.63v_B$ 时电子阻止截面测量结果[26]，三角形记号(△)是切雪尔(Cheshire)[27] 用修正的费尔索夫模型计算结果。平滑曲线是 LSS 理论所预言的能量损失，虚线是费尔索夫模型得到的。

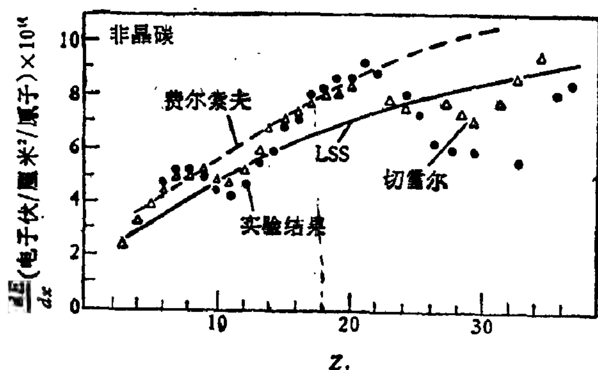


图 2.3-4 各种入射离子在非晶碳膜上的电子阻止截面．点(●)是实验测量[26]，三角形记号（△）是修正的费尔索夫模型[27]计算结果．平滑曲线是 LSS 理论预言的．虚线是费尔索夫模型

§ 2.4 电子阻止的量子力学处理

前面主要是在经典力学的基础上讨论电子能量损失．它同物理长度，如碰撞参数 p 或碰撞直径 $b(=2Z_1Z_2e^2/M_0v^2)$ 直接相联系．当 b 与德布罗意（de Broglie）波长 $\lambda\left(=\frac{\hbar}{M_0v}\right)$ 相当时，就需要用量子力学来计算电子阻止能力了．所以，经典力学实用范围的判据是 $b\gg\lambda$，也即

$$\frac{b}{\lambda}=\frac{2Z_1Z_2e^2}{\hbar v}\gg 1 \qquad (2.4\text{-}1)$$

否则就要采用贝特（Bethe）关于电子阻止的量子理论[3-5,18]。它是建立在平面波玻恩(Born)近似-量子力学微扰计算基础上的。本节在较详细地推出贝特公式之后，又讨论了它的实用性及其向玻尔(Bohr)公式的变换，并对中速区域的电子能量损失的研究状况进行了说明。

一 玻恩近似计算电子阻止能力

玻恩近似是在散射足够弱的情况下进行的。

如果一个人射粒子同一个原子相碰，这个系统的哈密顿是

$$H = H_0 + V \tag{2.4-2}$$

V 是粒子同原子的相互作用势。H_0 可以写成

$$H_0 = H_p + H_a \tag{2.4-3}$$

H_p 和 H_a 分别是自由粒子（人射粒子）和孤立原子的哈密顿函数.

近似方法的基本出发点是 $V \ll H_0$，V 看作一个微扰。在 $t = t_0$ 时，系统处在非微扰 H_0 的本征态，也即是，系统的波函数为 $\phi(t_0)$ 写成

$$\phi(t_0) = u_{n_0} \tag{2.4-4}$$

$$H_0 u_{n_0} = E_{n_0} u_{n_0} \tag{2.4-5}$$

这样，问题归结为解与时间有关的薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = (H_0 + V)\phi \tag{2.4-6}$$

将 $\phi(t)$ 展开成 H_0 本征函数 u_n 的线性组合

$$\phi(t) = \sum_n b_n(t) u_n \equiv \sum_n a_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} u_n \tag{2.4-7}$$

代入 (2.4-6) 式得

$$\sum_n \left\{ i\hbar \frac{\partial a_n}{\partial t} e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} u_n + E_n a_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} u_n \right\} = \sum_n E_n a_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} u_n + \sum_n V a_n(t) e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} u_n \tag{2.4-8}$$

取 $\hbar\omega_{kn} \equiv E_k - E_n$,

$$i\hbar\frac{\partial a_k}{\partial t}=\sum_n\langle k|V|n\rangle e^{i\omega_{kn}(t-t_0)}a_n(t) \tag{2.4-9}$$

根据微扰假设

$$a_{n_0}(t)\simeq 1,\ |a_n(t)|\ll 1,\ 当\ n\neq n_0 \tag{2.4-10}$$

方程 (2.4-9) 右边只包括 $n=n_0$ 的项，因此，对于与时间有关的势，我们得到

$$a_k(t)=-\frac{\langle k|V|n_0\rangle}{\hbar\omega_{kn_0}}[e^{i\omega_{kn_0}(t-t_0)}-1],\quad k\neq n_0 \tag{2.4-11}$$

于是，在时刻 t，系统处在 u_k 态的几率 $|a_k(t)|^2$ 是

$$|a_k(t)|^2=\frac{1}{\hbar^2\omega_{kn_0}^2}|\langle k|V|n_0\rangle|^2 4\sin^2\left[\frac{1}{2}\omega_{kn_0}(t-t_0)\right] \tag{2.4-12}$$

单位时间内跃迁到 k 态的几率

$$W_k(t)=\frac{d}{dt}|a_k(t)|^2=\frac{2}{\hbar^2}|\langle k|V|n_0\rangle|^2\times\frac{\sin\omega_{kn_0}(t-t_0)}{\omega_{kn_0}} \tag{2.4-13}$$

当 $\omega_{kn_0}(t-t_0)\to\infty$ 时，$W_n(t)$ 趋于与时间无关的表示式

$$W_n=\frac{2\pi}{\hbar}|\langle n|V|n_0\rangle|^2\delta(E_n-E_{n_0}) \tag{2.4-14}$$

式中态 $|n_0\rangle$ 和 $|n\rangle$ 分别是

$$\begin{aligned}|n_0\rangle&=\varphi_{n_0}(\mathbf{r}_i)\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}_0\cdot\mathbf{r}}\equiv\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}|n_0\mathbf{k}_0\rangle\\|n\rangle&=\varphi_n(\mathbf{r}_i)\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\equiv\frac{1}{(2\pi)^{3/2}}|n\mathbf{k}\rangle\end{aligned} \tag{2.4-15}$$

(2.4-14) 式中的 δ 函数保证碰撞前后系统总能量相同，

$$\varepsilon_{n_0}+\frac{\hbar^2k_0^2}{2M}=\varepsilon_n+\frac{\hbar k^2}{2M} \tag{2.4-16}$$

而且，由于 $|n\rangle$ 态对总系统是连续的，故可以确定对终态的跃迁率，此时原子停在 $\varphi_n(\mathbf{r}_i)$ 态而入射粒子离开了原子但仍在以 $\mathbf{k}$ 为中心的立体角 $d\Omega$ 内。所以，必须有

$$d^3\mathbf{k}=d\Omega\cdot k^2dk=d\Omega k\frac{M_1}{\hbar^2}dE_n \qquad (2.4\text{-}17)$$

其中 $E_n=\varepsilon_n+\hbar^2k^2/2M_1$. (2.4-14) 式对 $d^3\mathbf{k}$ 积分就得到单位时间单位立体角的跃迁几率

$$\frac{dW_{n,\mathbf{k}}}{d\Omega}=\frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{(2\pi)^6}|\langle n\mathbf{k}|V|n_0\mathbf{k}_0\rangle|^2\frac{kM_1}{\hbar^2} \qquad (2.4\text{-}18)$$

把原子激发到 n 态，而入射粒子处在 $\mathbf{k}$ 方向 (θ,φ)，则单位立体角的截面 $\sigma_n(\theta,\varphi)$ 是由 (2.4-18) 式除以入射粒子通量

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar\mathbf{k}_0}{M_1}$$

给出的。代入 $\hbar k_0/M_1=v$ 和 $\hbar k/M_1=v_f$ 后得到

$$\sigma_n(\theta,\varphi)=\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{M_1^2}{\hbar^4}\frac{v_f}{v}|\langle n\mathbf{k}|V|n_0\mathbf{k}_0\rangle|^2 \qquad (2.4\text{-}19)$$

由此可得到非弹性能量损失的表达式

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e=N\sum_n\int\sigma_n(\theta,\varphi)(\varepsilon_n-\varepsilon_{n_0})d\Omega \qquad (2.4\text{-}20)$$

计算中把原子核看作很重，原点就是原子核的位置如图 2.4-1. 假定碰撞前所有的原子均处在基态 n_0. 若入射粒子电荷为 Z_1e，则作用势为

$$V(r,\mathbf{r}_i)=-Z_1e^2\left[\sum_{i=1}^{Z_2}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}-\frac{Z_2}{r}\right] \qquad (2.4\text{-}21)$$

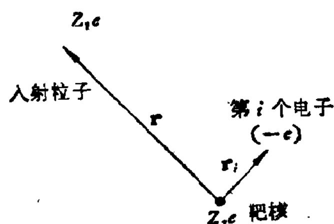


图 2.4-1 入射粒子同靶原子中的电子相互作用

由此可求出 (2.4-19) 截面表达式. 式 (2.4-21) 中的 $\mathbf{r}_i$ 表示第 i 个电子的位置

现在来化简式 (2.4-20) 中的截面 $\sigma_n(\theta,\varphi)$. 将 (2.4-19) 式中的矩阵元 $\langle n\mathbf{k}|V|n_0\mathbf{k}_0\rangle$ 对入射粒子坐标 $\mathbf{r}$ 积分. 由于式 (2.4-20) 中只有 $\varepsilon_n\neq\varepsilon_{n_0}$ 的项有贡献，所以取 $n\neq n_0$ 的项及 $\mathbf{q}=\mathbf{k}_0-\mathbf{k}$，求出

$$\langle n\mathbf{k}|V|n_0\mathbf{k}_0\rangle = \int d^3\mathbf{r}_1\cdots\int d^3\mathbf{r}_{Z_2}\int d^3\mathbf{r}\varphi_n^*(\mathbf{r}_1\cdots,$$

$$\mathbf{r}_{Z_2})\varphi_{n_0}(\mathbf{r}_1\cdots,\mathbf{r}_{Z_2})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\left[-\sum_{i=1}^{Z_2}\frac{Z_1e^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}+\frac{Z_1Z_2e^2}{r}\right]$$

$$= -Z_1e^2\int d^3\mathbf{r}_1\cdots\int d^3\mathbf{r}_{Z_2}\varphi_n^*(\mathbf{r}_j)\varphi_{n_0}(\mathbf{r}_j)\int d^3\mathbf{r}\,e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$$

$$\times\sum_{i=1}^{Z_2}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} = -Z_1e^2\int d^3\mathbf{r}_1\cdots$$

$$\times\int d^3\mathbf{r}_{Z_2}\varphi_n^*(\mathbf{r}_j)\varphi_{n_0}(\mathbf{r}_j)\frac{1}{q^2}\int d^3\mathbf{r}\sum_{i=1}^{Z_2}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|}$$

$$\times(-\Delta_\mathbf{r})e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \frac{Z_1e^2}{q^2}\int d^3\mathbf{r}_1\cdots\int d^3\mathbf{r}_{Z_2}\varphi_n^*(\mathbf{r}_j)\varphi_{n_0}(\mathbf{r}_j)$$

$$\times\int d^3\mathbf{r}\,e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\Delta_\mathbf{r}\sum_{i=1}^{Z_2}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} = \frac{Z_1e^2}{q^2}\int d^3\mathbf{r}_1\cdots$$

$$\times\int d^3\mathbf{r}_{Z_2}\varphi_n^*(\mathbf{r}_j)\varphi_{n_0}(\mathbf{r}_j)\int d^3\mathbf{r}\,e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\sum_{i=1}^{Z_2}(-4\pi\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i))$$

$$= -\frac{4\pi Z_1e^2}{q^2}\int d^3\mathbf{r}_1\cdots\int d^3\mathbf{r}_{Z_2}\varphi_n^*(\mathbf{r}_1\cdots,\mathbf{r}_{Z_2})$$

$$\times\varphi_{n_0}(\mathbf{r}_1\cdots,\mathbf{r}_{Z_2})\sum_{i=1}^{Z_2}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} \qquad (2.4\text{-}22)$$

组合(2.4-19)式、(2.4-20)式和(2.4-22)式可得到$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4Z_1^2e^4M_1^2}{\hbar^4 v}N\sum_n\int d\Omega(\varepsilon_n-\varepsilon_{n_0})$$

$$\times\frac{v_f}{q^4}|\langle n|\sum_{i=1}^{Z_2}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}|n_0\rangle|^2 \qquad (2.4\text{-}23)$$

其中$\mathbf{q}$是由ε_n和(θ,φ)唯一地确定的. 微分立体角是$d\Omega=\sin\theta d\theta d\varphi$, $\mathbf{k}$的方向由(θ,φ)确定而其长度从能量守恒(2.4-16)式中得到.

从图2.4-2可以得到如下关系

$$q^2 = k^2 + k_0^2 - 2kk_0\cos\theta \qquad (2.4\text{-}24)$$

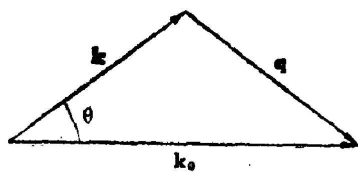


图 2.4-2　$\mathbf{q} \equiv \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}$ 示意图

固定 **k** 的长度，会有

$$2qdq = 2kk_0 \sin\theta d\theta$$

$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta = 2\pi \frac{qdq}{kk_0} \tag{2.4-25}$$

以及 **q** 的下限 $q_{\min}$

$$q_{\min} = k_0 - k \tag{2.4-26}$$

把 (2.4-25) 式代入 (2.4-23) 方程

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{8\pi Z_1^2 e^4}{\hbar^2 v^2} N \sum_n \int \frac{dq}{q^3}$$

$$\times (\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}) |\langle n| \sum_{i=1}^{Z_2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} |n_0\rangle|^2 \tag{2.4-27}$$

假定有不等式

$$\frac{q}{k_0} \ll 1 \tag{2.4-28}$$

则 (2.4-26) 式的 $q_{\min}$ 可以变换为

$$q_{\min} = \frac{k_0^2 - k^2}{k_0 + k} \simeq \frac{\hbar^2}{2M_1}(k_0^2 - k^2)\frac{2M_1}{\hbar^2}\frac{1}{2k_0}$$

$$= (\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0})\frac{1}{\hbar v} \equiv \frac{\omega_{nn_0}}{v} \tag{2.4-29}$$

在 (2.4-27) 式中固定 n 并从 $q_{\min}$ 到 $(k_0 + k)$ 对 q 进行积分，可以看到，积分矩阵元在大的 q 值时为零。所以，对 q 积分在远小于 $q = k_0 + k$ 的值就截止了.

为了要较精确地定出 $q_{\max}$，这相当于对头碰的情形，即 $\theta = 0$，固定 q 值，在 $qa \gg 1$ （a是原子距离）时，可能只有一个单散射

角满足(2.4-24)式和方程

$$\frac{\hbar k_0^2}{2M_1}=\frac{\hbar^2 k^2}{2M_1}+\frac{\hbar^2 q^2}{2m} \qquad (2.4\text{-}30)$$

当 $\theta=0$ 时，上式的解必须满足

$$k_0=k+q \qquad (2.4\text{-}31)$$

结果有

$$\hbar q_{\max}=\frac{2m}{M_1+m}\hbar k_0 \qquad (2.4\text{-}32)$$

如果入射粒子比电子重，则 $q_{\max}=\frac{2m}{M_1}k_0$，显然这比 $2k_0$ 小得多．所以，在重的入射粒子情况下，(2.4-28)式的条件满足所有可能的动量转移．而 $\hbar q_{\max}$ 是任何碰撞中最大可能的动量转移，它相应于最大可能的能量转移 $T_{e,\max}$．

方程(2.4-27)中的取和和积分可以看成在 (q,ω) 平面上的面积分．如果各种可能的能量转移在一定能区内构成一个分立系，那么面积分可以退化为一组线积分．它之所以能退化为线积分是因为我们可采用原子物理中的哈特雷(Hartree)函数来描述波函数 $|n\rangle$

$$|n\rangle=\varphi_1(\mathbf{r}_1)\varphi_2(\mathbf{r}_2)\cdots\varphi_{Z_2}(\mathbf{r}_{Z_2}) \qquad (2.4\text{-}33)$$

这表明电子之间没有关联．也即是说，在 $\mathbf{r}_1$ 找到粒子 1 和同时在 $\mathbf{r}_2$ 找到粒子 2 的几率是两个独立几率 $|\varphi_1(\mathbf{r}_1)|^2$ 和 $|\varphi_2(\mathbf{r}_2)|^2$ 的乘积．当然，这并不是说，电子彼此之间不会接近，但是，在基态时，电子之间有一定距离．如果电子 1 是在 r_1，那么在 $\mathbf{r}_2\approx\mathbf{r}_1$ 处寻找电子 2 的几率就应很小．同样，如果是一个电子气体，那么，在产生高密度和低密度电子区域时电子会被激发(所谓等离子振荡)．因此，在哈特里描述中我们有：第一，在大动量转移时碰撞发生很快，以致靶粒子间的束缚力来不及影响动量转移；第二，在详细处理电子气体时，电子之间的关联作用仅在小动量转移是重要的．

使用(2.4-33)式的波函数表达式，在 $qa\gg1$ 时，只得到一个线积分的结果．因此，我们可比较容易地在 (q,ω) 平面上确定相

当于 $q \geqslant \frac{1}{a}$ 那一部分对 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ 的贡献，如图 2.4-3 所示。积分区域是 $\frac{1}{a} \leqslant q \leqslant q_{max}$，$0 \leqslant \omega < \infty$. $\hbar q_{max} = 2mv$ 大于 $\hbar/a$ 的条件，显然表明入射粒子速度 v 比电子速度大。

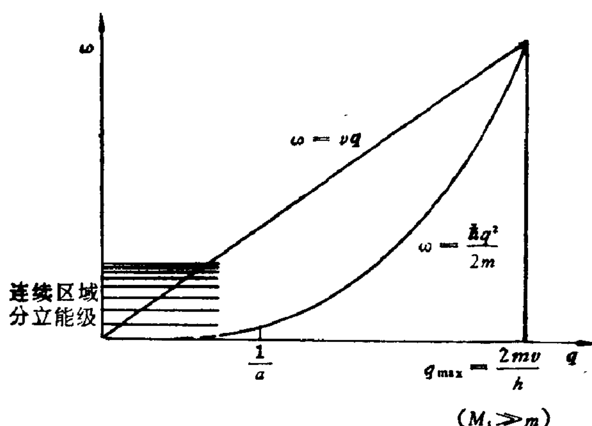


图 2.4-3 （q，ω）平面

在 $q \geqslant \frac{1}{a}$ 的区域讨论（2.4-27）式中的积分 $I_{q>\frac{1}{a}}$，

$$I_{q>\frac{1}{a}} = \int_{\frac{1}{a}}^{\frac{2mv}{\hbar}} \frac{dq}{q^3} \sum_{\substack{n \\ 0<\varepsilon_n<\infty}} (\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}) |\langle n| \sum_{i=1}^{Z_2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} |n_0\rangle|^2$$

（2.4-34）

式中把取和与积分次序交换了一下以适应 $q \geqslant \frac{1}{a}$. 这是很有用的，因为这样做就得到对一个完备系 $|n\rangle$ 的取和. 若在固定 q 时用 $\hbar^2 q^2/2m$ 来代替 q 就有

$$\sum_{\substack{n \\ 0<\varepsilon_n<\infty}} (\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}) |\langle n| \sum_{i=1}^{Z_2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} |n_0\rangle|^2$$

$$\simeq \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \sum_n \langle n| \sum_{i=1}^{Z_2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} |n_0\rangle^* \langle n| \sum_{i=1}^{Z_2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} |n_0\rangle$$

$$= \frac{\hbar^2 q^2}{2m} \sum_n \langle n_0| \sum_{j=1}^{Z_2} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} |n\rangle \langle n| \sum_{i=1}^{Z_2} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} |n_0\rangle$$

$$=\frac{\hbar^2q^2}{2m}\langle n_0|\sum_{i,j=1}^{Z_2}e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)}|n_0\rangle.$$

由于 $qa\gg 1$，只有 $i=j$ 的项有贡献

$$\sum_n(\varepsilon_n-\varepsilon_{n_0})|\langle n|\sum_{i=1}^{Z_2}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}|n_0\rangle|^2\simeq Z_2\frac{\hbar^2q^2}{2m}\quad(2.4\text{-}35)$$

对所有 $\mathbf{q}$ 值，有如下取和规则

$$\sum_n F_{nn_0}(\mathbf{q})=1,$$

$$F_{nn_0}(\mathbf{q})=\frac{1}{Z_2}\frac{2m}{\hbar^2q^2}(\varepsilon_n-\varepsilon_{n0})|\langle n|\sum_{i=1}^{Z_2}e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}|n_0\rangle|^2\,(2.4\text{-}36)$$

$F_{nn_0}(\mathbf{q})$ 为广义的振子强度.

应用 (2.4-36) 式得到 $I_{q>\frac{1}{a}}$ 为

$$I_{q>\frac{1}{a}}=Z_2\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\log\frac{2mv}{\hbar\frac{1}{a}}\qquad(2.4\text{-}37)$$

再来计算积分 $I_{q<\frac{1}{a}}$，

$$I_{q<\frac{1}{a}}=Z_2\frac{\hbar^2}{2m}\sum_n\int_{\frac{\omega_{nn_0}}{v}}^{\frac{1}{a}}\frac{dq}{q}F_{nn_0}(\mathbf{q})\qquad(2.4\text{-}38)$$

此时 q 积分下限依赖于 n. 如果要调换积分同取和的次序，那么从图 2.4-3 中看到对 n 取和已经有了限制. 所以，(2.4-36) 式的取和规则不再适合. 为此，我们采用比 1 小的指数表示 $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i}$，将其展开并代入 $F_{nn_0}(\mathbf{q})$. 在 $\langle n|n_0\rangle=\delta_{nn_0}$ 时我们得到

$$F_{nn_0}(\mathbf{q})\xrightarrow[\mathbf{q}\to 0^+]{}\frac{1}{Z_2}\frac{2m}{\hbar^2q^2}(\varepsilon_n-\varepsilon_{n_0})|\mathbf{q}\cdot\langle n|\sum_{i=1}^{Z_2}\mathbf{r}_i|n_0\rangle|^2\quad(2.4\text{-}39)$$

在 $q\to 0$ 极限时，振子强度趋于一个常数，但常数值依赖于 $\mathbf{q}$ 的方向. 若假定基态 $|n_0\rangle$ 是各向同性的，则说明 $|n_0\rangle$ 是非简并的；如果激态 $|n\rangle$ 是各向同性的，矩阵元则由于对称性而消失.

在 (2.4-38) 式中对 n 取和包含着对 $(\varepsilon_n-\varepsilon_{n_0})$ 一个固定值的所有态取和，于是在 (2.4-39) 式中引入如下替换

$$|\mathbf{q}\cdot\langle n|\sum_{i=1}^{Z_2}\mathbf{r}_i|n_0\rangle|^2=q^2|\langle n|(\mathbf{q}/q)\cdot\sum_{i=1}^{Z_2}\mathbf{r}_i|n_0\rangle|^2$$

$$\to \frac{1}{3} q^2 |\langle n| \sum_{i=1}^{Z_2} \mathbf{r}_i |n_0\rangle|^2 \qquad (2.4\text{-}40)$$

因此，(2.4-40) 式中的广义振子强度 $F_{nn_0}(\mathbf{q})$ 可用偶极强度 f_{nn_0} 来代替

$$f_{nn_0} \equiv \frac{1}{Z_2} \frac{2}{3} \frac{m}{\hbar^2} (\varepsilon_n - \varepsilon_{n_0}) |\langle n| \sum_{i=1}^{Z_2} \mathbf{r}_i |n_0\rangle|^2 \qquad (2.4\text{-}41)$$

偶极振子强度 f_{nn} 的重要特征是与 $\mathbf{q}$ 无关. 于是 (2.4-38) 式积分可得

$$I_{q\leqslant 1/a} = Z_2 \frac{h^2}{2m} \sum_n f_{nn_0} \log \frac{\frac{1}{a} v}{\omega_{nn_0}} \qquad (2.4\text{-}42)$$

上式通常表示成

$$I_{q\leqslant 1/a} = Z_2 \cdot \frac{h^2}{2m} \log \frac{\hbar \frac{1}{a} v}{I} \qquad (2.4\text{-}43)$$

$$\log I \equiv \sum_m f_{nn_0} \log \hbar \omega_{nn_0} \qquad (2.4\text{-}44)$$

最后把式 (2.4-34)、(2.4-37)和 (2.4-43) 代入方程 (2.4-27) 就得到非弹性能量损失的贝特公式

$$\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} N \cdot Z_2 \log \frac{2mv^2}{I} \qquad (2.4\text{-}45)$$

其中 I 由 (2.4-44) 式给出.

公式 (2.4-45) 直接给出 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ 同 v 和 Z_1 的关系. 能量 I 是由靶原子的性质确定的. 然而，要得到 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ 完整的理论描述，还必须计算激发频率 ω_{nn_0} 和相应的偶极振子强度 f_{nn_0}. 当然严格计算只能在氢原子的情况下进行. 此时 $I = 15$ 电子伏特. 最简单的情况是 $f_{n_1 n_0}$(n_1 是第一激发态)，相应的能量是 $\varepsilon_{n_1} - \varepsilon_{n_0} = \hbar\omega$，所以，(2.4-45) 式 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ 中的 $I = \hbar\omega$.

在什么情况下贝特公式的推导是成立的?从图2.4-3 及取和规

则(2.4-36)式可看出，计算中假定存在 $\frac{1}{a}$，把积分分成 $I_{q>1/a}$ 和 $I_{q<1/a}$ 得出：(1)在 $q<\frac{1}{a}$ 时，用 $f_{nn_0}=F_{nn_0}(O^+)$ 来代替 $F_{nn_0}(q)$；(2)在入射粒子速度为 v 时，表示一个较低的束缚．当谐振子在基态时，量 ωa 代表典型的电子速度 v_e，所以贝特公式的推演是建立在

$$v > v_e \tag{2.4-46}$$

的假定上．在 $Z_2 \gg 1$ 时，由统计模型可得

$$\hbar\varpi \sim \frac{e^2}{2a_0} Z_2 \tag{2.4-47}$$

及 $a \sim a_0 Z_2^{-1/3}$ 即得贝特公式适用条件

$$v > a \cdot \varpi \sim a_0 Z_2^{-1/3} \frac{1}{2} \frac{e^2}{ha_0} Z_2 = \frac{1}{2} v_B Z_2^{2/3}. \tag{2.4-48}$$

公式(2.4-45)中的对数项只与粒子速度 v 和介质的性质有关，用 L 表示．贝特公式可以写成

$$S_e = \left(\frac{-1}{N}\frac{dE}{dx}\right)_e = Z_2 \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{mv} \cdot L \tag{2.4-49}$$

不过，此时 L 只能近似为

$$L \approx \log \frac{2mv^2}{I} \tag{2.4-50}$$

其中 $I \approx I_0 Z_2$ 为原子的平均激发势，$I_0 \sim \frac{e^2}{2a_0}$，这就是布洛赫(Bloch)近似[28]．不过，要得到 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ 完整的理论描述，还要计算激发频率 ω_{nn_0} 和相应的偶极振子强度 f_{nn_0}，严格的数学计算只能在氢原子情况进行．两个理想情况：频率为 ω 的谐振子和等离子频率为 ω 的自由电子气，可以分别代表单粒子行为和极化效应．此时，(2.4-50)式为

$$L = \log \frac{2mv^2}{\hbar\omega} \tag{2.4-51}$$

二　贝特公式的修正

贝特对于高速带电粒子受到电子阻止的完整表达式为

$$S_e = N\frac{4\pi Z_1^2 Z_2 e^4}{mv^2}\log\frac{2mv^2}{I} - \left[\log\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right) - \frac{v^2}{c^2} - \frac{c}{Z_2} - \frac{\delta}{2}\right] \tag{2.4-52}$$

式中含 $\frac{v^2}{c^2}$ 的两项是相对论修正项，$\frac{c}{Z_2}$ 是与速度有关的项，只是在低速时才有意义，它属于低速时没有参加电离和激发的内壳层电子，$\frac{\delta}{2}$ 是密度效应对阻止截面的贡献．后两项均是靶原子和粒子速度的函数．所谓密度效应是指很高速粒子穿进介质引起介质的极化[29]，使图 2.1-2 能量损失曲线从虚线退化成高能区的实线．显然，入射粒子速度快，所有靶电子均对阻止能力作贡献，没有壳效应的修正．但是，如果速度不太快，处于内壳层的电子对阻止能力贡献少，必须考虑壳层效应的修正．常常写成

$$\frac{c}{Z_2} = (c_K + c_L + \cdots\cdots)/Z_2 \tag{2.4-53}$$

c_K 和 c_L 分别表示 K 壳层和 L 壳层的阻止能力．由于平均激发和电离能 I 与能量无关，而壳层效应与能量有关，因此，实验上可以确定出来[30]．

快速入射粒子的能量损失还同其它许多因素有关．有些与靶结构有关，如结构效应 (Softky)[31]．化学效应 (Bragg 规则)和固态效应[32]；有些则与入射粒子的情形有关，如入射粒子的电荷状态——巴尔克斯 (Barkas) 效应，离子团效应等．这些情况我们在后面还会遇到，这里先简要说明巴尔克斯效应和离子团效应．

(1) 巴尔克斯效应[33]

带正电和带负电的粒子在物质中运动所受的阻止情形不同，这说明阻止截面同 Z_1^3 和 Z_1^4 有关．可是 (2.4-46) 式的阻止截面仅与 Z_1^2 有关，其对数项与 Z_1 无关，因此，不能直接用它来表示巴尔

克斯效应的影响。在不考虑相对论效应和密度效应的情况下，可把(2.4-52)式中的 L 看作是 Z_1 的函数并展开成 Z_1 的幂级数

$$L = L_0 + Z_1 L_1 + Z_1^2 L_2 + \cdots\cdots \tag{2.4-54}$$

$$L_0 = \log \frac{2mv^2}{I}$$

L_1 对应于 Z_1^3, L_2 对应于 Z_1^4, 等等. 实验上，在进行巴尔克斯测量时，若是比较正离子和负离子的区别，只需 L_1, 可采用相对变化

$$B = \frac{Z_1 L_1}{L_0} \tag{2.4-55}$$

称为巴尔克斯修正因子.若是比较两个不同电荷数的正电粒子，则 L_1 和 L_2 均起作用.

由于电子在近碰时基本上是自由的，故认为没有修正. 而远碰时，采用偶极近似，可把原子电子轨道半径 a_ω 作为碰撞参数的下限，这样得到 Z_1^3 修正项公式[34]

$$Z_1 L_1 = \frac{3\pi}{2} \frac{Z_1 e^2 \omega}{mv^3} \log\left(\frac{v}{1.7\omega a_\omega}\right) \tag{2.4-56}$$

a_ω 为截止距离. 若取 $a_\omega = \sqrt{\frac{h}{2m\omega}}$ 是振子的量子半径，则 (2.4-

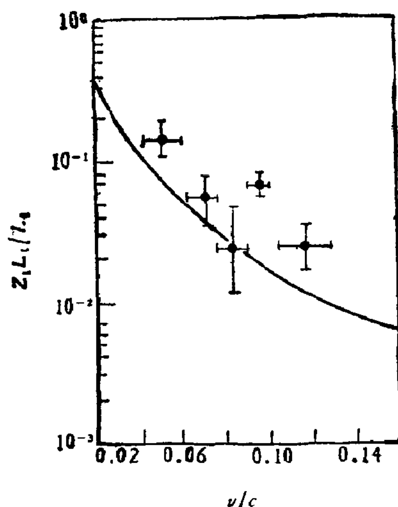


图.2.4-4 巴尔克斯效应的理论计算[35]和 $\pi^\pm$ 实验测得阻止的相对差别[36]

56）式中的对数项几乎是（2.4-46）贝特公式中的一半[35]．图 2.4-4 是上述计算结果同实验比较，实验是 $\pm\pi$ 介子在物质中受到的阻止[36]．图 2.4-5 则是速度相同的质子和 α 粒子在铝和钽[37]、银和金中的阻止截面．可见，理论结果和实验结果符合得相当好．

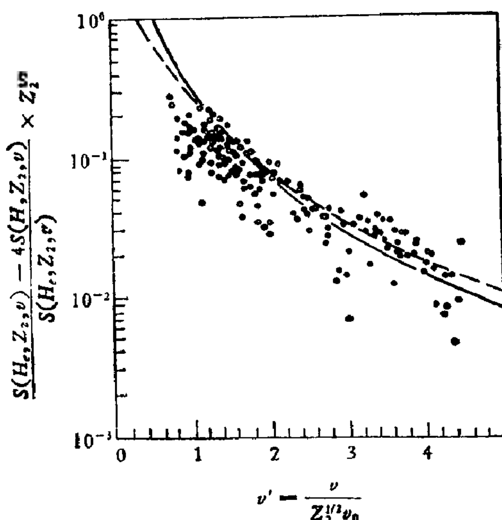


图 2.4-5 α 粒子和质子在铝等样品中阻止的差别[37]，图中实线是文献［35］计算的，虚线是［34］的结果．横坐标为约化速度

（2）离子团效应

当一个分子以 $v>v_0$ 进入物质时，价电子被剥离，变成分子离子在介质中传播．其传播方式受到离子同介质相互作用、离子团中的离子同离子通过尾流相互作用和离子间的库仑斥力的影响，使入射粒子在凝聚态中的运动更为复杂，其能量损失大于单个粒子．

首先，离子团中的离子彼此相斥，原子核之间的距离随时间增加．最后造成库仑爆炸．速度 v、原子序数 Z 的离子有效电荷为

$$Z_{\text{eff}}(v)=Z\left[1-\exp\left(\frac{-v}{Z^{2/3}v_0}\right)\right] \qquad (2.4\text{-}57)$$

它与密集介质的组分无关．如果入射粒子是由离子（Z_a，M_a）和

(Z_b, M_b) 构成的双离子团，其间距从 $R(0)=R_0$ 增加到 $R(t)$ 所需的时间是

$$t=t_0\left\{\sqrt{\frac{R}{R_0}\left(\frac{R}{R_0}-1\right)}+\ln\left[\sqrt{\frac{R}{R_0}}+\sqrt{\frac{R}{R_0}-1}\right]\right\} \tag{2.4-58}$$

其中

$$t_0\equiv(\mu' R_0^3/2Z_aZ_be^2)^{1/2},\quad \mu'=\frac{M_aM_b}{M_a+M_b}$$

图 2.4-6 绘出 $\frac{R}{R_0}$ 随时间的变化(虚线)，此时 $R(t)\leqslant\frac{v}{\omega_0}$，实曲线是 $R(t)$ 对初始质子距离分布的平均 $\bar{R}(t)$[38]. R_0 的分布是由分子离子在离子源电离过程中产生转动态配分函数给出的. 图的左上角示出氢离子分子 H_2^+ 的 R_0 的分布，初始平均距离 $\bar{R}_0=1.29$ Å，而氢分子离子 H_2^+ 的基态距离为 1.06 Å.

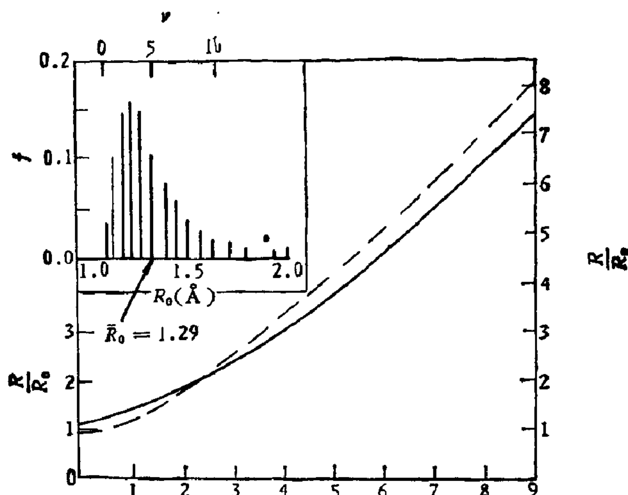


图 2.4-6 双离子团中原子核间距 $R(t)$ 随时间变化(虚线)，$t_0\equiv(\mu' R^3/2Z_1Z_2e^2)$，对于 H_2^+，$R_0=1.06$ Å，$t_0=60.6$ 原子单位 $=1.46\times10^{-15}$ 秒. 实线是 $R(t)$ 对初始质子距离分布的平均. 左上角是 R_0 的分布，初始平均距离 $\bar{R}_0=1.29$ Å

H_2^+ 束激发的核共振反应已经证实了简单离子团的库仑爆炸. 共振宽度则是离子团中两氢原子间相对速度的量度. 当 $R(t)$ 超过

v/ω_0 时，库仑斥力基本上为介质所屏蔽，于是离子则以不变的相对速度继续分离.

其次，尾流的出现.高速粒子通过密集物质在粒子后面的电子密度会出现周期性振荡，即共振尾流[39]. 在金属中，这种振荡是导电子和离子芯外电子的等离子振荡；在绝缘体中则是一种类似的集体振荡.

运动粒子后面电子密度波动的尾流会建立一个势 $U(r)$. 在运动粒子的坐标系内其形式为

$$U(r) = (Z_1 e\omega_0/v)[V(r) - 2\sin(\omega_0 z/v) \times K_0(\omega_0\rho_0/v)\exp(-\gamma z/2v)H(z)] \quad (2.4\text{-}59)$$

式中 z 和 ρ_0 是柱坐标，轴中心是在入射粒子的轨道方向，即一 $\mathbf{v}$，K_0 是第二类修正贝塞耳函数，γ 为相干振子的阻尼率，$H(z)$ 为步进函数. (2.4-59) 式中 $V(r)$ 为靠近粒子的势，这里无需考虑. 图 2.4-7 绘出在前导正电荷 $+Z_1e$ 的尾流中负电荷 $-e$ 势能 $U(r) = -eu(r)$ 的振动部分.跟随粒子受到尾流力的作用已为平

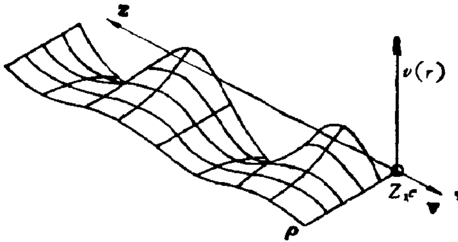


图 2.4-7 前导正电荷 $+Z_1e$ 尾流振荡部分中单位负电荷 $-e$ 的势能示意图

面沟道条件下自晶体出射 $(HeH)^+$ 束的质子分布测量所证实，如图 2.4-8[40]. 而且，质子对的双峰能量分布具有不对称性[41]，跟随质子(由于库仑斥力向后，故是低能端的峰)要比前导质子多. 表明尾流给跟随质子施加了一个横向的力.

由于上述因素，对离子团的阻止能力同团中两离子之间的距离相关. 若两者分开很远，则离子团的能量损失是两个分量之和；如果离子 Z_a 和 Z_b 之间的距离 $R_{ab}(t)$ 比某个特征距离 r_{cl} 短，

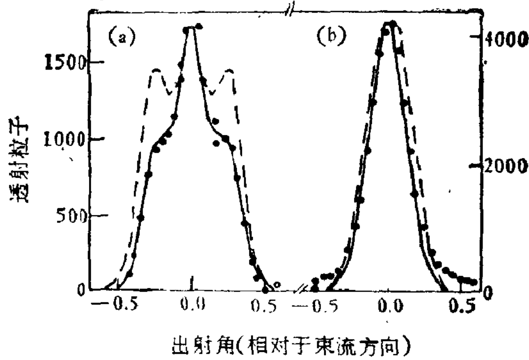


图 2.4-8 靶厚为 535 Å 的金晶的 (111) 平面沟道测量得到的出射粒子角分布：(a) 4兆电子伏，$^4HeH^+$ 中的质子，(b)1.6 兆电子伏 D_2^+ 的氘．实线是方程 (2.4-59) 有尾流计算的结果，虚线则为没有尾流时计算的[40]

则离子团所起的作用相当于一个有效电荷 Z_c^2 的点电荷，$Z_c^2 = (\sum Z_i)^2$；在中等距离，尾流相互作用产生相干项，而这些相干项在以屏蔽长度 v/ω_0 为单位测量核间距离中是周期性的．

用介电函数 $\varepsilon(k, \omega)$ 表征介质阻止能力为[38]

$$S_c = N\frac{2e^2}{\pi v^2}\int_0^\infty K\alpha K\int_0^\infty \frac{\omega d\omega}{K^2+\omega^2/v^2}\ \mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\varepsilon(K,\omega)}\right)\cdot$$

$$\cdot\left[Z_a^2+Z_b^2+2Z_aZ_bJ_0(kR_\rho)\cos(\omega R_z/v)\right] \quad (2.4\text{-}60)$$

式中 $k = K + \omega^2/v^2$，R_z 和 R_ρ 分别是两离子分离矢量 $\mathbf{R}$ 在 $\mathbf{z}$ 和 $\boldsymbol{\rho}$ 上的投影．式 (2.4-60) 中最后一项是尾流的干涉效应，J_0 是第一类零阶贝塞耳函数．许多固体的价电子气都能维持在集体振荡频率 ω_0，因此可以采用如下近似

$$I_m\left(\frac{-1}{\varepsilon(k,\ \omega)}\right) \approx \frac{1}{2}\pi(\omega_0/\omega_k)\delta(\omega-\omega_k)$$

和

$$\omega_k \approx \omega_0^2 + k^4/4m^2$$

方程 (2.4-60) 变成

$$S_c = N\frac{e^2\omega_0^2}{v^2}L\left[Z_a^2+Z_b^2+2Z_aZ_bg\left(\frac{\mathbf{R}\omega_0}{v}\right)\right] \quad (2.4\text{-}61)$$

当 $v \gg v_0$ 时，阻止数为

$$L = \int_0^\infty \frac{KdK}{K^2 + \omega_k^2/v^2} = \ln\frac{2mv^2}{\hbar\omega_0}$$

这就是(2.4-48)贝特公式. (2.4-61)式中的干涉函数 $g(\mathbf{R}\omega_0/v)$ 表明一个粒子尾流对另一个粒子阻止力的影响，这种影响沿 z 方向是周期性的，在 ρ 方向是指数衰减，如方程(2.4-59)和图 2.4-7 所示.

若对离子团的各种取向作平均，$g(\mathbf{R}\omega_0/v)$ 变成仅依赖于 $R = |\mathbf{R}|$ 的函数 $G(R\omega_0/v)$，如图 2.4-9 所示. 当 $R < r_{cl} = \frac{\hbar}{2mv}$ 时，$G \cong 1$ 和 $Z_c^2 \approx (Z_a + Z_b)^2$；当 $r_{cl} < R < r_{dist} = \frac{v}{\omega_0}$，$G$ 接近于 $\frac{1}{2}$ 且随 R 缓慢变化，以致 $Z_c^2 \approx \frac{1}{2}[(Z_a^2 + Z_b^2)+(Z_a + Z_b)^2]$；当 $R > r_{dist}$，G 很快地降到很小的值且发生振荡，但振幅逐渐减小至 0，于是 $Z_c^2 \approx Z_a^2 + Z_b^2$，就象两个独立的"点"粒子. 对应的阻止截面为

$$\left.\begin{aligned}
&S_c = (\sum Z_i)^2 S_p,\ (i = a, b),\ \text{当}\ R < r_{cl}\\
&S_c = \frac{1}{2}[\sum Z_i^2 + (\sum Z_i)^2] S_p,\ r_{cl} < R < r_{dist},\ \text{即}\ \tau < \bar{\tau}\\
&S_c = \sum Z_i^2 S_p,\ R > r_{dist}
\end{aligned}\right\} \tag{2.4-62}$$

这就是离子团阻止能力的配分规则. S_p 是单个质子的阻止截面，

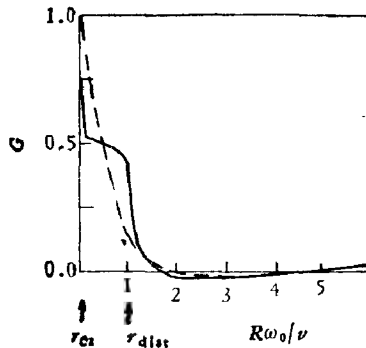


图 2.4-9 相干函数 G 随 $R\omega_0/v$ 的变化. 虚线表示高速近似分析的结果

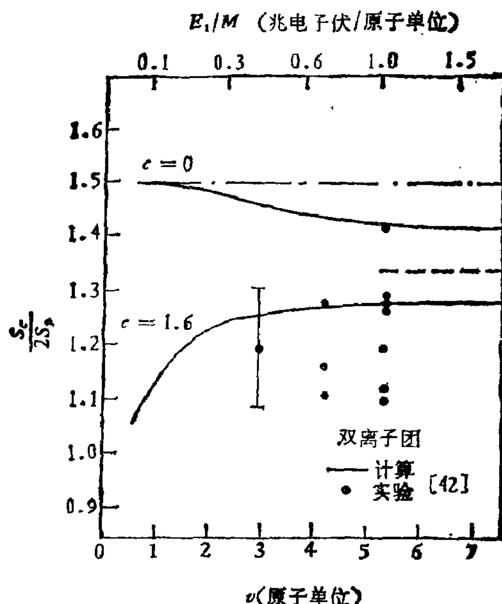


图 2.4-10 在 $\tau \ll \bar{\tau}$ 时，H_2^+ 在碳中阻止截面同质子阻止截面之比随入射粒子速度的变化．上曲线是 $C=0$，下曲线 $C=1.6$．两者在高速时趋于相同的渐近线 1.33

$i=a, b$．τ 是离子团在介质中居留时间，$\bar{\tau}=\tau(u/\omega_0\bar{R}_0)$ 为离子团在其原子核间距 $\bar{R}(t)$ 到达 $r_{\text{dist}}=v/\omega_0$ 之前的居留时间．图 2.4-10 给出在 $\tau \ll \bar{\tau}$ 时氢分子离子 H_2^+ 在碳中阻止截面同质子阻止截面之比随入射粒子速度的变化．上曲线对应于 $C=0$ 的均分规则（C 为配分函数），示出 $S_c/2S_p$ 随速度变化慢；下曲线是配分函数 $C=1.6$ 时得到的，它表明单粒子碰撞多于集体共振激发，从而减少了周围环境的影响．但两者曲线均渐近地趋于 1.33．

快速分子进入凝集态物质，价电子被剥离，化学键被破坏，离子团中的离子由于库仑斥力而分离，产生库仑爆炸，以及离子团中运动粒子的尾流引起离子-离子之间动力学相互作用的现象，不仅是当前理论和实验研究运动粒子同固体相互作用中很有兴趣的课题，也是原子分子物理的重要内容之一．

三　中速区域的电子能量损失

贝特公式 (2.5-52) 适用于高速入射粒子，LSS 和费尔索夫理论适用于低速区域．在中速区域，即能量损失靠近最大处（如图 2.1-1）还没有精确的理论表达．由于入射粒子电荷在这个能量区域已部分中性化，并且内壳层电子对阻止能力贡献小，因此贝特公式在经过靶原子壳效应修正后，有可能用到该能区的某些情况．但是，当 $I \simeq 2mv^2$ 时，(2.4-52) 式完全依赖于 $-C/Z_2$，贝特公式不再适用了．目前除了经验方法外，中能区的能量损失知道很少．人们从如下几方面进行内插和外推来得到中速区域的电子能量损失．

(i) 入射粒子的电荷状态标度能量损失，使得有可能在靶和入射速度一定的情况下，从一种入射粒子的能量损失转换到另一种入射粒子．由于贝特基本结果表现为能量损失仅是靶物质的性质，而同入射粒子特性的关系只是一个标度因子 Z_1^2（未记上述的巴尔克斯和离子团效应），因此，阻止能力容易从一种入射粒子 A 外推到另一种入射粒子 B

$$\frac{1}{Z_A^2}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{A,v} = \frac{1}{Z_B^2}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{B,v}, \qquad (2.4-63)$$

A 和 B 是两种不同入射粒子的原子数．对于重离子 ($Z_1 \geqslant 35$)，采用更一般的关系式

$$\frac{1}{Z_A^{*2}}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{A,v} = \frac{1}{Z_B^{*2}}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{B,v} \qquad (2.4-64)$$

Z_A^* 和 Z_B^* 为速度 v 运动离子 A 和 B 的有效电荷．图 2.4-11 是不同速度的铀、碘和溴离子入射到碳、铝、镍、银和金箔上的电子阻止能力，证实了上述关系，实线则是用

$$Z_1^*/Z_1 = 1 - 1.034\exp\left(-\frac{v}{v_0}Z_1^{-0.688}\right) \qquad (2.4-65)$$

拟合得到的[43]．$v_0 = 2.19 \times 10^8$ 厘米/秒，v 是离子速度．

(ii) 三参数曲线拟合可使一定入射粒子-靶组合系统的能量

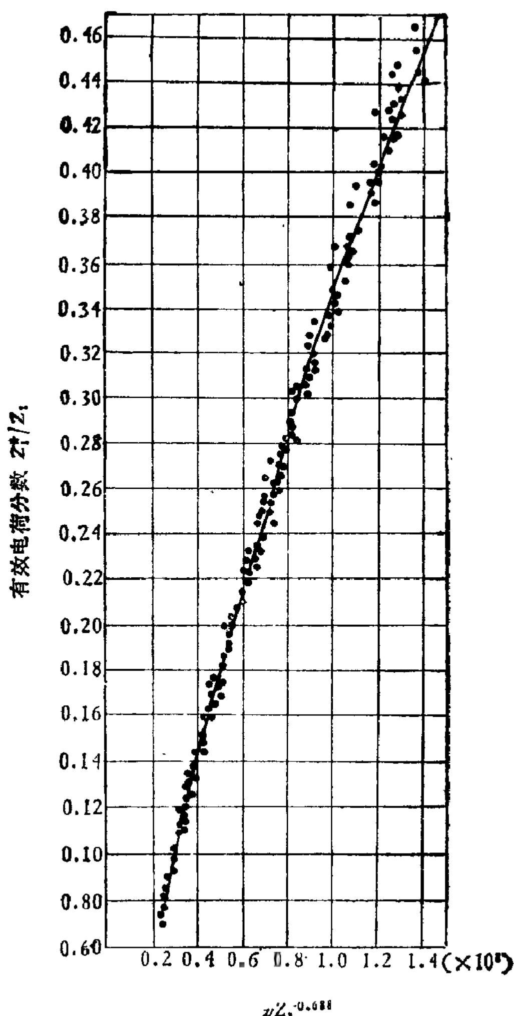


图 2.4-11 铀、碘、溴离子在碳、铝、镍、银和金箔中的电子阻止能力[43]. Z_1^* 是各种入射粒子的有效电荷，质子的阻止能力取自文献[12]. 实线是方程(2.4-65)拟合的结果、

损失从一个能区内插到另一个能区.

(iii) 在入射粒子和入射速度一定时，可用哈特雷-福克-斯莱特 (Slater) 电荷分布计算出的半经验关系把能量损失从一种靶物质推演到另一种，图 2.4-12 是 2MeV ^{4}He 阻止截面同 Z_2 的关系，

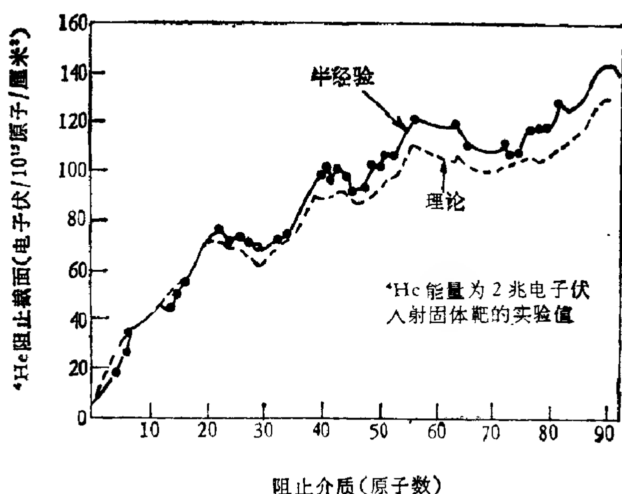


图 2.4-12　2 兆电子伏 ⁴He 阻止截面的半经验值

实线是内插法得到的[44]，虚线是早期理论计算的结果[45].

内插和外推的精度取决于数据库的精度和数量. 所以，不同的情况会有差别. 一般来说，只要求内插合理精度可达 10% 以内.

四　阻止截面的线性相加

上面讨论的能量损失仅限于单元素靶. 现在来讨论一下化合物靶. 在最简单的近似图象中，当粒子迅速进入介质时，其能量损失是通过两个粒子——入射粒子同靶原子电子、入射粒子同原子中心——随机碰撞的结果. 在这个图象里，可把化合物靶看成是不同元素组合一起构成的，并把入射粒子同靶相互作用看成是一次仅同一个原子的碰撞. 因此，在一定入射速度下，每次碰撞传给电子或原子核心的能量是相同的，而不计靶原子周围的情况如何. 这样，入射粒子在含有各种元素介质中的能量损失是各组分元素在该化合物中丰度与其能量损失乘积之和. 这就是阻止截面线性相加原理. 它是 1905 年由布喇格和克利曼（Kleeman）考虑分子情况时首先提出的，即所谓布喇格规则[46]. 这就是说，一个靶分子

A_mB_n 或混合物的阻止截面是

$$S^{A_mB_n} = mS^A + nS^B \tag{2.4-66}$$

其中 S^A 和 S^B 分别为靶原子组分 A 和 B 的阻止截面. 令一化合物靶中分子 A_mB_n 的体密度是 $N^{A_mB_n}$，那么，其能量损失为

$$\frac{-dE^{A_mB_n}}{dx} = N^{A_mB_n}S^{A_mB_n} \tag{2.4-66a}$$

对高速质子 ($v \gg v_0$)，这个规则的偏差仅为 1%；对入射粒子为 1—2 兆电子伏的 ^{4}He 在金属合金和金属化合物靶中，布喇格规则均符合得很好. 但对一般的气体化合物靶来说，如氧化物、氮化物等要偏离 10% 左右，有的甚至要偏离 40%，这时必须考虑化学结合效应[47]. 于是，方程 (2.4-66) 变成

$$S^{A_mB_n} = mS^A + nS^B + \Delta S^{A_mB_n} \tag{2.4-67}$$

$\Delta S^{A_mB_n}$ 是靶分子中各个化学键对阻止截面贡献之和. 表 2.4-1 给出实验测得硼和钽及其化合物 TaB 和 TaB_2 的阻止截面 S^B、S^{Ta}、S^{TaB} 和 S^{TaB_2}. 得到了 ΔS^{TaB} 和 ΔS^{TaB_2}，均为负值. 不同的化合物，化学效应对阻止截面的贡献也不同.

表 2.4-1 化学效应对TaB和TaB_2阻止截面的影响[47]

靶物质	阻 止 截 面 S
B	26.7±0.1
Ta	61.7±0.8
TaB	81.8±0.7→$\Delta S^{TaB} = -6.6\pm1.1$
TaB_2	86.4±0.6→$\Delta S^{TaB_2} = -28.7\pm1.0$

§ 2.5 能量损失的测量方法

测量能量损失的方法有好多种. 一类是所谓直接方法，即制备薄片或薄膜，测量薄膜厚度和束流透过膜的总能量损失，以得到阻止截面；一类是所谓间接方法，即测量与阻止截面有间接关系的物理量，如离子射程、背散射谱、靶中化合物原子核发射 γ 射线的多普勒位移. 其中大部分内容在以后的章节中谈到，这里仅就最近发

展起来的既简便又很精确的方法——固体探测器上薄层透射测量[48]——加以说明．其基本原理是：采用一个带有很薄吸收层的粒子探测器，把探测器相对入射粒子束流方向倾斜，这样可以改变吸收层的有效厚度．实验时，吸收层恰好等于离子注入硅探测器所产生的 400 Å 硅的死层．在探测器倾斜时，死层的厚度可从 Δx 变到 $\Delta x'$，如图 2.5-1 所示．探测器的灵敏区应足够厚，使得所有穿过吸收层的粒子能停止在灵敏区．

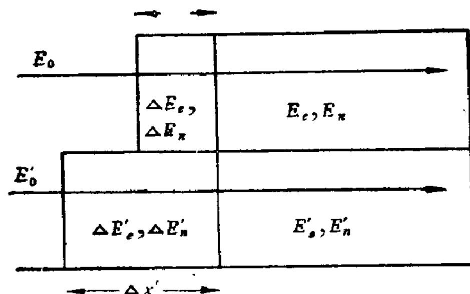


图 2.5-1　确定电子（E_e，ΔE_e）和核（E_n，ΔE_n）阻止截面示意图

总阻止截面由两部分组成并与离子的能量有关

$$E_0 = E_c + \Delta E_c + \Delta E_n + E_n, \quad \text{对 } \Delta x \text{ 层}, \qquad (2.5\text{-}1)$$

E_0 为入射粒子的能量，ΔE_c 和 ΔE_n 分别是吸收层 Δx 中的电子和核能量损失，E_n 是灵敏区的核能量损失，E_c 是灵敏区总电离，为固体探测器的响应，是可测量的．若用倾斜或蒸发使吸收层的有效厚度从 Δx 增加到 $\Delta x'$，则由图 2.5-1 可得

$$E'_0 = E'_c + \Delta E'_c + \Delta E'_n + E'_n, \quad \text{对 } \Delta x' \text{ 层}, \qquad (2.5\text{-}2)$$

(2.5-2) 式和 (2.5-1) 式相减有

$$E'_0 - E_0 = (E'_c - E_c) + (\Delta E'_c - \Delta E_c) + (\Delta E'_n - \Delta E_n) + (E'_n - E_n), \quad \Delta x' - \Delta x \text{ 层}, \qquad (2.5\text{-}3)$$

其中 E'_c 和 E_c 是可测量的量，E'_0 和 E_0 是已知的入射粒子能量，是可以调节的．

调节 E'_0 使 E'_c 和 E_c 信号相等(即 $E'_c = E_c$)，这就要求图 2.5-

1 的吸收层和灵敏层两界面能量相等；因此，$E'_n = E_n$，方程（2.5-3）化为

$$E'_0 - E_0 = (\Delta E'_e - \Delta E_e) + (\Delta E'_n - \Delta E_n)$$
$$= N(\Delta x' - \Delta x)(S_e + S_n) \quad (2.5\text{-}4)$$

于是，可以计算出总阻止截面.

如果用相同的入射能量测量，也即，$E'_0 = E_0$，(2.5-3) 式变成

$$E_e - E'_e = (\Delta E'_e - \Delta E_e) + (E'_n + \Delta E'_n - E_n - \Delta E_n) \quad (2.5\text{-}5)$$

由于 $E'_0 = E_0$，沉积在靶中核能总量是守恒的，即

$$E'_n + \Delta E'_n = E_n + \Delta E_n \quad (2.5\text{-}6)$$

因此，

$$E_e - E'_e = \Delta E'_e - \Delta E_e = N(\Delta x' - \Delta x)S_e \quad (2.5\text{-}7)$$

这就可以算出电子阻止截面.

用这种巧妙的方法可以确定入射粒子速度不高情况下的电子和总阻止截面，当然也很容易得到核阻止截面了. 图 2.5-2 是用

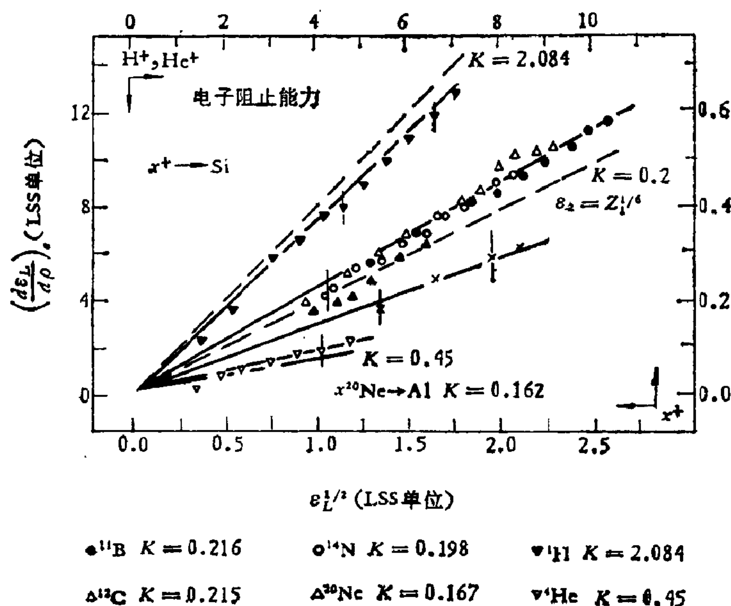


图 2.5-2 不同离子在硅和铝中电子阻止截面的实验(点)和理论值(虚线)[48]单位取 LSS 单位

这种方法测得的电子阻止截面，在 ±5% 的误差范围内遵从 $\varepsilon_L^{1/2}$ 规律，ε 是以 LSS 单位的．图 2.5-3 则是核阻止截面，显然比 LSS 理论所预言的要低很多．

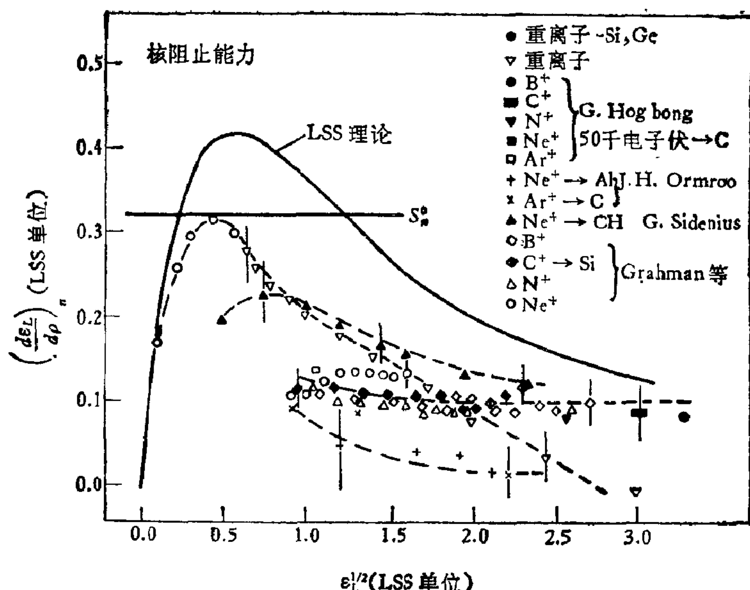


图 2.5-3 核阻止截面的理论和实验值[48]单位取 LSS 单位

§2.6 能 量 离 散

一个运动的粒子进入介质后，经多次独立碰撞而损失能量．这种量子过程存在着统计涨落．换句话说，如果一束单能带电粒子穿过厚度为 Δx 的靶物质后，其能量不再是单能，而是一个分布，如图 2.6-1 所示．显然，能量损失 ΔE 也受这种涨落的影响．能量离散不仅影响能量损失的界限，而且影响着背散射谱的深度分辨率(见第四章)，因此，研究靶物质和厚度及入射粒子一定组合下的能量离散的大小是很重要的．

一个速度一定的粒子穿过厚度 Δx 的薄靶，经受 n_i 次碰撞，相应的能量转移是 T_i．若对束流中所有的粒子求平均，则可得到

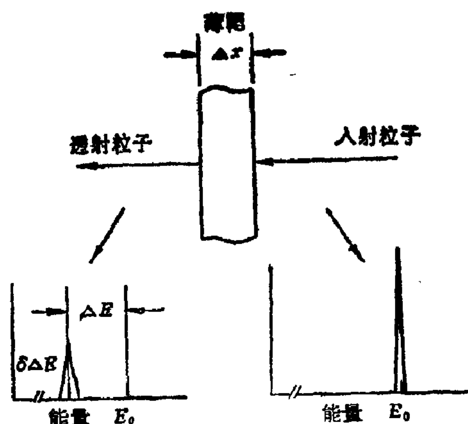


图 2.6-1 接近单能 E_0 的束流经厚度为 Δx 的薄膜能量损失为 ΔE，而能量离散使能谱加宽

平均的能量损失 $\overline{(-\Delta E)}$，

$$\overline{(-\Delta E)} = \overline{\sum_i n_i T_i} = \sum_i \bar{n}_i T_i \qquad (2.6\text{-}1)$$

那么，能量损失的均方波动，也即能量离散可写成

$$\Omega^2 \equiv \overline{((-\Delta E) - \overline{(-\Delta E)})^2} \qquad (2.6\text{-}2)$$

假定不同能量转移 T_i 和 T_j 之间是彼此独立的，于是有

$$\Omega^2 = \overline{\sum_i T_i(n_i - \bar{n}_i) \sum_j T_j(n_j - \bar{n}_j)} = \sum_i T_i^2 \overline{(n_i - \bar{n}_i)^2}$$

$$= \sum_i T_i^2 (\overline{n_i^2} - (\bar{n}_i)^2) \qquad (2.6\text{-}3)$$

若粒子穿透时能量损失很小且沿粒子路径的散射几率不变，则能量转移 T_i 数目 n_i (即是碰撞数目)遵从泊松分布，因此有

$$\Omega^2 = \sum_i T_i^2 \bar{n}_i \qquad (2.6\text{-}4)$$

引入散射截面并用积分代替取和可得

$$\Omega^2 = N \cdot \Delta x \int dT \frac{d\sigma}{dT} \cdot T^2 \qquad (2.6\text{-}5)$$

我们已经讨论过能量损失机理，无论是平均能量损失还是多重散

射，均可近似分成核贡献和电子贡献．因此一个入射粒子对单个原子的能量转移可表示成

$$T = T_n + T_e \tag{2.6-6}$$

然而，我们不能由此就立刻把 Ω^2 也分成核贡献和电子贡献．不过，先假定各种能量转移不是关联的，那么，(2.6-5) 式是可用的．然后，再考虑关联问题．

用 $d\sigma_{n,e}$ 表示一个碰撞在间隔 (T_n, $T_n + dT_n$) 弹性能量损失和 ($T_e, T_e + dT_e$) 非弹性能量损失的微分散射截面．把 (2.6-6) 式代入 (2.6-5) 式

$$\begin{aligned}\Omega^2 &= N \cdot \Delta x \int d\sigma_{n,e}(T_n + T_e)^2 \\ &= N \cdot \Delta x \left[\int d\sigma_n T_n^2 + \int d\sigma_e T_e^2 \quad + 2\int d\sigma_{n,e} T_n \cdot T_e\right]\end{aligned} \tag{2.6-7}$$

$d\sigma_n$ 表示间隔 ($T_n, T_n + dT_n$) 弹性能量损失总截面，也即是说，截面 $d\sigma_{n,e}$ 对所有可能的非弹性能量转移 T_e 的积分．同样可以得 $d\sigma_e$．

一　电子对能量离散的贡献

先讨论电子的贡献

$$\Omega_e^2 = N \cdot \Delta x \int d\sigma_e \cdot T_e^2 \tag{2.6-8}$$

若 $Z_1 \leqslant Z_2$，且入射粒子速度比靶电子速度 $v_0 Z_2^{2/3}$ 大，即满足 $\chi_e <$ 1，于是由 (2.1-8) 微分散射截面公式和上式得到

$$\Omega_e^2 = N \cdot \Delta x \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} Z_2 \int \frac{dT}{T^2} T^2 \tag{2.6-9}$$

注意在应用 (2.1-8) 式已把 M_2 换成电子质量 m．积分上限 $T_{\max,e} = 2mv^2 (M_1 \gg m)$，下限可适当选择平均电离能．然而，由于入射粒子速度 v 大于电子速度，所以这种平均电离能同 $T_{\max,e}$ 相比显然很小．因此，(2.6-9) 式近似表达为

$$\Omega_e^2 \simeq \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{mv^2} Z_2 \cdot N \cdot \Delta x \cdot T_{\max,e} = 4\pi Z_1^2 e^4 Z_2 N \cdot \Delta x. \tag{2.6-10}$$

这个结果是玻尔首先用经典方法导出的[49]。故又叫能量离散的玻尔值。它表明能量离散同入射粒子的能量无关，而能量变化的均方值随靶中单位面积电子密度 $NZ_2\Delta x$ 的平方根而增加。图 2.6-2 给出 Ω_e^2 同 Z_2 的关系。电子能量离散随 Z_2 增加而增加的一般趋势，但由于元素密度 N 的不同而出现许多峰值的结构。用 $\Omega_e^2/N\Delta x$ 可以消除这种变化。用 10^{-12}（电子伏-厘米）^{2}作单位，可把这个值制成表，以便快速估计能量离散。

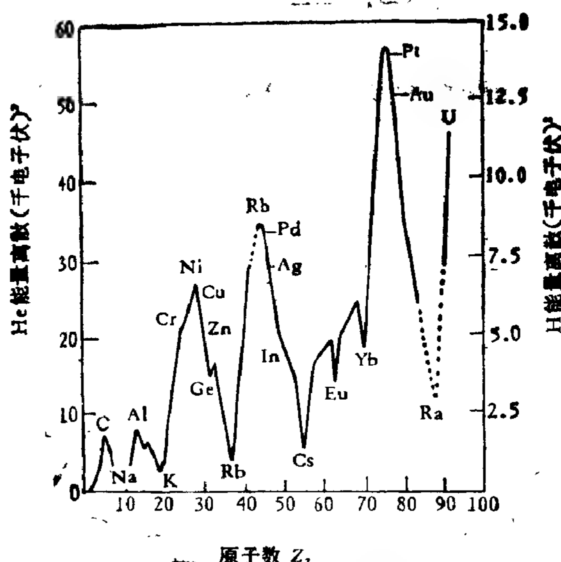


图 2.6-2 根据玻尔关于电子能量损失同靶原子数的经典模型得到厚度 $\Delta x = 1000$ Å 的能量离散值 $\Omega_e^2 = 4\pi Z_1^2 e^4 Z_2 N\Delta x$

比较由 Ω_e 给出 ΔE 的变化同 ΔE 本身可以得到另外一个有用的关系。采用贝特关于 $\left(-\frac{dE}{dx}\right)_e$ 的公式（2.4-46）并代入速度 v 沿路径的平均值，如 $\bar{E} = \frac{1}{2} M_1 \overline{v^2}$，可得

$$\frac{\Omega_e}{\Delta E}=\left(\frac{\bar{E}}{\Delta E}\frac{2}{L}\frac{m}{M_1}\right)^{1/2}, \qquad (2.6\text{-}11)$$

m是电子质量。若入射粒子为^{4}He，比率$(m/M_1)^{1/2}$约为10^{-2}。这时，略去$2/L$，得到

$$\frac{\Omega_e}{\Delta E}\simeq\left(\frac{\bar{E}}{\Delta E}\right)^{1/2}\times 10^{-2}. \qquad (2.6\text{-}12)$$

所以，Ω_e近似是ΔE和$\bar{E}$几何平均值的1%。这样，经过125千电子伏能量损失的2兆电子伏氦离子具有能量离散的标准偏差约为$\left(\frac{2.0}{0.125}\right)^{1/2}\%=4\%$。表2.6-1给出Al、Ni和Au靶的^{4}He离子$(\Omega_{exp}/\Delta E)^{1/2}$的实验值。可以看出，这个比值确为一常数。同(2.6-12)式预计的差不多。不过，它只能给出一个概貌，而不能给出确切的量值。

表2.6-1 实验观察^{4}He穿过靶片Al, Ni, Au能量离散的标准偏差*

靶元素	N(微克/厘米^2)	Δx (Å)	ΔE(千电子伏)	Ω_{exp}(千电子伏)	$\Omega_{exp}/\Delta E$ (%)	$(\bar{E}/\Delta E)^{1/2}$ (%)	$\bar{E}$ (兆电子伏)
Al	120	4300	125	7.0	5.6	4	2.0
Ni	180	2000	125	5.6	4.5	4	2.0
Au	370	1900	125	5.1	4.1	4	2.0
Al	60	5900	200	7.0	3.5	2.2	1.0
Ni	260	2900	200	5.6	2.8	2.2	1.0
Au	520	2700	200	5.1	2.6	2.2	1.0

* 选择靶片厚度使三种元素有相同的ΔE。实验数据是从文献[50]得到的。

玻尔模型假定是自由的静电子和荷电Z_1e的完全电离的粒子之间的能量转移。这些假定仅适用贝特-布洛赫(Bloch)区域(见图2.1-1)。在能量损失最大值附近以及低于它的能量区域，入射粒子为完全电离的假定不再成立。因为随着入射粒子能量的降低，电子不再能看作自由的，而是束缚在原子上。林哈德和沙尔夫[51]推广了玻尔理论，建立了适用于低能和中能区域的能量离散公式

$$\begin{aligned}\Omega_{e,L}^2&=\Omega_e^2\ \frac{1}{2}L(\chi), \quad \chi\leqslant 3\\&=\Omega_e^2 \qquad\qquad \chi\geqslant 3,\end{aligned} \qquad (2.6\text{-}13)$$

其中 $\chi = v^2/Z_2v_0^2$，为能量的约化变量，$L(\chi)$ 为阻止数．如果采用更精密的哈特里-福克-斯莱特型原子的电荷分布来改善林哈德-沙尔夫表达式，则理论计算同实验符合[52,53]．

玻尔的能量离散理论不仅给出一个束流穿过介质时的标准偏差 Ω_e，而且预言了其分布为高斯分布．之所以有这样的结果，是由于假定了碰撞数目大，并且遵从泊松分布的结果．显然这是近似的，因为任何能量的高斯分布有一个确定的幅度而透射束不可能包含有能量大于 E_0 的粒子．因此，能量离散的精确描述一定会存在一个相对于平均值不对称的分布函数．这个问题早在 40 年代朗道在理论上研究束流通过很薄吸收体的能量离散时发现的[54]，并为最近用质子通过硅片的透射实验所证实[55]．对于入射粒子在能量 1 到 2 兆电子伏的 ^1H 和 ^4He，这种不对称效应低于普通固态

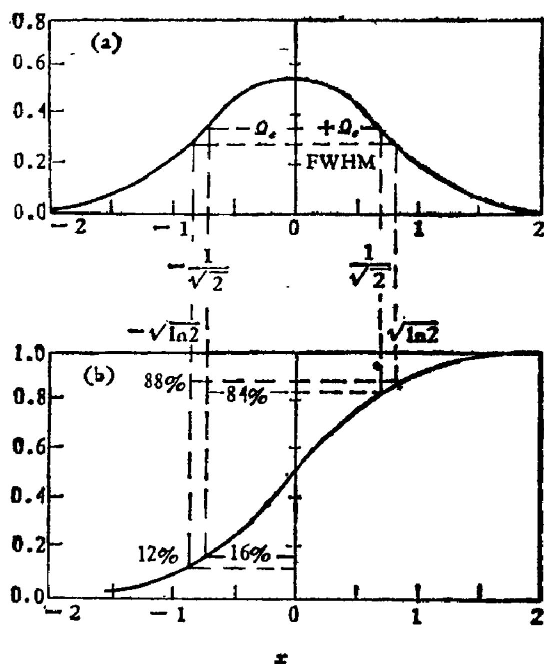


图 2.6-3 (a) 高斯分布 $(2\pi\Omega_e^2)^{-1/2}\exp[-(x^2/2\Omega_e^2)]$，其中 $\Omega = \frac{1}{2}$

(b) 对应的误差函数 $\operatorname{erf}(x) = (2\pi\Omega_e^2)^{-1/2}\cdot\int_{-\infty}^{x}\exp[-(x^2/2\Omega_e^2)]$

探测器的分辨率。因此，对背散射谱的测量分析中高斯分布相当满意地描述了能量离散。背散射谱通常是高斯分布的积分，即误差函数

$$\mathrm{erf}(x) = (2\pi\Omega_e^2)^{-1/2}\int_{-\infty}^{x}\exp[-(x^2/2\Omega_e^2)]dx \quad (2.6\text{-}14)$$

而不是高斯分布

$$(2\pi\Omega_e^2)^{-1/2}\exp[-(x^2/2\Omega_e^2)]$$

两者之间的关系绘于图 2.6-3 $\left(注意：\Omega_e 取为 \frac{1}{2}\right)$. 高斯分布最大值的半宽度(FWHM)相应于误差函数的 12—88% 的范围。高斯分布中的 $\pm\Omega_e$ 点对应于 16—84% 的点. FWHM 要比 Ω 宽大约 $2(2\ln 2)^{\frac{1}{2}} = 2.355$.

二 核碰撞对能量离散的影响

在计算核碰撞对能量离散的贡献时，仍然应用经典轨道描述，碰撞参数 p 和能量转移之间的关系为 (2.1-7) 式. 若考虑屏蔽，则有

$$\Omega_n^2 = \left[\frac{2Z_1^2Z_2^2e^4}{M_2v^2}\right]^2 N\cdot\Delta x\int_{p=0}^{p=a}\frac{\pi d(p^2)}{\left[p^2+\left(\frac{b}{2}\right)^2\right]^2} \quad (2.6\text{-}15)$$

a 代表原子的大小. 在 $\frac{b}{2} < p$ 时，被积函数随 p 的增加而减少得很快. 当 $a\to\infty$ 时，就等于对所有能量转移使用汤姆孙截面，由此得到

$$\Omega_n^2 = \frac{2\pi Z_1^2Z_2^2e^4}{M_2v^2}N\cdot\Delta x\cdot T_{\max,n}$$

$$= 4\pi Z_1^2Z_2^2e^4\left(\frac{M_1}{M_1+M_2}\right)^2 N\cdot\Delta x \quad (2.6\text{-}16)$$

在条件 $v > v_0Z_2^{2/3}$ 和 $\chi_n > 1$ 中要求速度 v 的范围应是 $v_0Z_2^{2/3}<v<2Z_1Z_2v_0$. 不过，条件 $\chi_n > 1$ 仅是在积分 $\int d\sigma_n\cdot T_n^2$ 主要由大能量转移控制的，此时汤姆孙截面可在整个间隔 $0 < T \leqslant T_{\max}$ 范围

内应用.

现在来讨论 (2.6-7) 式的第三项 $2\int d\sigma_{n,e}T_n\cdot T_e$. 同 $\int d\sigma_n\cdot T_n^2+\int d\sigma_e\cdot T_e^2$ 相比，它可以忽略，因为核碰撞是对应于碰撞参数在原子核周围很小的区域，在这个区域求电子贡献是可以忽略的. 为此，我们求对应于一次核碰撞中能量转移 $T_{\max,e}=2mv^2$ 的碰撞参数 $p_{\min}$. 根据 (2.1-7) 式，有

$$\frac{2Z_1^2Z_2^2e^4}{M_2v^2}\frac{1}{P_{\min}^2}=2mv^2 \tag{2.6-17}$$

或 $a\approx a_0Z_2^{-1/3}$ 和 $\langle v^2\rangle\simeq v_0^2Z_2^{4/3}$

$$\left(\frac{p}{a}\right)^2\simeq Z_1^2\frac{m}{M_2}\frac{v_0^2Z_2^{4/3}}{v^4} \tag{2.6-18}$$

在原子核周围很小的区域内[约为 $\pi(p)^2$]，T_e 比 T_n 小；而在其它区域里 T_n 比 T_e 小. 这样把积分区域分为内区和外区，就有

$$\int d\sigma_{n,e}T_n\cdot T_e=\int_{内区}d\sigma_{n,e}T_n\cdot T_e+\int_{外区}d\sigma_{n,e}T_n\cdot T_e$$

$$\ll\int_{内区}d\sigma_{n,e}T_n^2+\int_{外区}d\sigma_{n,e}T_e^2 \tag{2.6-19}$$

在内区，由于 $p_{\min}>b$，因此积分可以扩展到包括所有的碰撞参数，电子能量转移 T_e 与特定的原子核碰撞参数关系不大. 相反，我们得到来自大碰撞参数区域的贡献，可把积分从外区扩至整个区域. 所以，把两区域合起来 (2.6-19) 式为

$$\int d\sigma_{n,e}T_n\cdot T_e\ll\int d\sigma_n\cdot T_n^2+\int d\sigma_e\cdot T_e^2. \tag{2.6-20}$$

要把 Q^2 当作 (2.6-10) 式和 (2.6-16) 式之和，必须把各种能量转移看成是非相关过程. 由于多重散射的原因，弹性和非弹性散射之间可能有关联. 不过，在内区，忽略了电子碰撞，因此不必担心核和电子碰撞之间的关联.

在外区，$T_n<T_{\max,e}$，能量转移 T 可以从弹性和非弹性碰撞中得到. 当相对于核的碰撞参数 $P<a$ 时，求平均能量损失时可

以忽略共振碰撞。这样，两类碰撞的截面比类似于式 (2.1-14)

$$\frac{d\sigma(T)_n}{d\sigma(T)_e}=\frac{Z_1^2}{M_2}\frac{m}{Z_2}\simeq\frac{m}{2M_P} \tag{2.6-21}$$

此式已把内区对 $\left(\frac{d\sigma}{dT}\right)_e$ 的贡献忽略了。按照这个表达式，在一个原子核和一个电子碰撞可把相同能量传给一个原子时，核截面非常小。那么，人们要问弹性能量损失经典总截面（约为 πa^2）的剩余部分到哪里去了。这个大的截面属于比电子碰撞中能量转移小得多的能量转移。因此，如果能量转移大，核截面可忽略；而如果截面大则核能量转移可以忽略。所以，在 $p_{min}\leqslant p<a$ 时，略去核碰撞；在 $p>a$ 时，没有核贡献。这样，不管内区还是外区，都没有关联问题。

现在来讨论 Ω_e^2 和 Ω_n^2 相加等于 Ω^2 的问题。讨论过程中的计算工作是在 Z_1 低而速度 v 高的情况下进行的。这时入射粒子可以看成是没有电子的原子核同最初是静止的靶电子碰撞。由 (2.6-10) 式和 (2.6-16) 式得到

$$\frac{\Omega_e^2}{\Omega_n^2}=\frac{1}{Z_2}\left(\frac{M_1+M_2}{M_1}\right)^2$$

$$=\begin{cases}4 & Z_1=Z_2=1\\ \sim 4Z_e & Z_1=1\text{ 和 }Z_2\gg 1\\ \sim\frac{1}{Z_1}\cdot\frac{Z_2}{Z_1} & Z_1>1\text{ 和 }Z_2\gg Z_1\end{cases} \tag{2.6-22}$$

当质子入射到较重的材料上时，电子贡献是主要的。例如，碳中的 α 粒子，$\Omega_e^2/\Omega_n^2=8$。一般说来，对于轻入射粒子，电子贡献是主要的。但在 $Z_1\sim Z_2$ 时，核贡献引起的修正就不可忽视了。

三　能量离散的线性相加

截止目前，低于 2 兆电子伏的 ^{1}H 和 ^{4}He 在固体靶中的能量离散的实验数据很少。固体化合物靶的能量离散数据还没有，故需要这方面的信息。至今关于固态化合物或混合物 A_mB_n 中的能量离散均是假定的[53]；令 N_A 和 N_B 是单个元素 A 和 B 的体密度，

$N^{A_mB_n}$是混合物或化合物中组分单元 A_mB_n 的体密度．假定厚度为 Δx，在元素 A 和 B 中的能量离散分别是

$$\begin{aligned}(\Omega_e^A)^2 &= 4\pi(Z_1e^2)^2N_AZ_A\Delta x\\ (\Omega_e^B)^2 &= 4\pi(Z_1e^2)^2N_BZ_B\Delta x\end{aligned} \tag{2.6-23}$$

这就是说：$(\Omega_e^A)^2/N_AZ_A\Delta x = (\Omega_e^B)^2/N_BZ_B\Delta x = 4\pi(Z_1e^2)^2$ 与靶无关，它是厚度 Δx 单位靶面积中每个电子能量变化的平方．把玻尔理论推广到一个化合物靶的情况，得到这个比率应与靶的组分无关，或者表示成

$$\frac{(\Omega_e^{A_mB_n})^2}{\text{靶厚度}\times\text{单位面积的电子数}} = 4\pi(Z_1e^2)^2 \tag{2.6-24}$$

因此，

$$(\Omega_e^{A_mB_n})^2 = 4\pi(Z_1e^2)^2N^{A_mB_n}(mZ_A + nZ_B)\Delta x \tag{2.6-25}$$

最后这三个因子给出靶单位面积的电子数．上式也可写成

$$\frac{(\Omega_e^{A_mB_n})^2}{N^{A_mB_n}} = m\frac{(\Omega_e^A)^2}{N_A\Delta x} + n\frac{(\Omega_e^B)^2}{N_B\Delta x} \tag{2.6-26}$$

这就是能量离散线性相加的假定，还有待于实验验证．

§2.7　离子穿进物质的电荷状态

带电粒子穿进物质后在同原子碰撞过程中不断地俘获和失去电子而使自己的电荷状态发生变化．理论上离子穿进物质后其电荷状态的分布可以通过电子俘获和电子损失截面来计算．然而这些截面很难得到，所以大多数情况下还是采用一些经验方法，给出入射粒子电荷态分数同靶厚、入射粒子种类和碰撞能量之间的关系．但是，重离子情况至今还没有满意的结果．

当一个电荷为 Q_1 的离子同一原子碰撞，有如图 2.7-1 所示的几个过程使 Q_1 变成 Q_1'．

(i) 离子俘获一个或多个束缚的靶电子进入任何没有占据的束缚态，可以是基态，也可以是激发态．俘获过程可以是非辐射的（库仑俘获），也可以是辐射的．

(ii) 离子由于库仑激发损失了一个或多个电子而进入连续区，离子是留在基态还是激态将取决于失去的是外壳层电子还是内壳层电子.

(iii) 人射离子上有一个或多个电子激发到较高的束缚态.

(iv) 上述过程产生的激态通过发射一个或多个电子甚至不发射电子衰变，它取决于最初的总激发程度和跃迁的选择定则.在大多数情况下，单激发和多重激发离子经 X-射线和电子发射衰变.

(v) 当一个离子在碰撞前已经处在激发态，上述的(1)-(3)过程也能发生.

(vi) 若靶原子在碰撞前是中性的，其会出现上述的(2)-(4)过程.

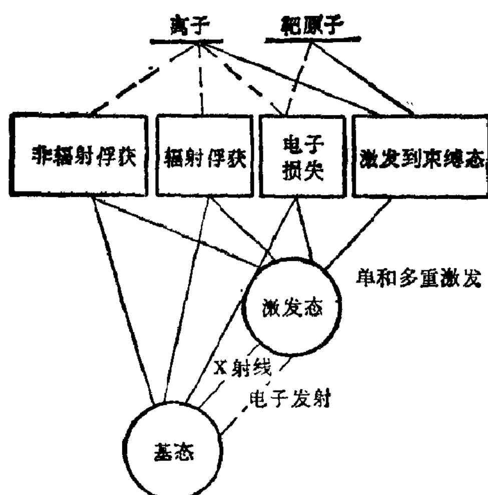


图 2.7-1　引起离子电荷变化的离子-原子碰撞的基本过程示意图. 虚线表示电荷改变过程

显然，基本现象并不多，但是当多电子原子和离子参加碰撞时情况就很复杂. 而且，在一次碰撞中会有几种过程同时发生.

习惯上，用离子-原子单次碰撞截面 $\sigma(Q_1, Q_1')$ 来表示过程 $Q_1 \to Q_1'$ 的电荷改变几率的纯效应，其单位是厘米²/原子或厘米²/

分子。有时表示成 $\sigma(Q, Q+n)$，n 为正值表示损失电子，负值代表俘获电子。若用 σ_l 和 σ_c 分别表示电子损失和电子俘获截面，则总截面为

$$\sigma_T = \sigma_l + \sigma_c \tag{2.7-1}$$

而

$$F_1 = \frac{\sigma_c}{\sigma_T}, \quad F_2 = \frac{\sigma_l}{\sigma_T} \tag{2.7-2}$$

为电荷平衡因子。

一 电子俘获和损失

一个质子同氢原子碰撞的非辐射电子俘获是最简单的情况，因为这时只考虑质子和电子的相互作用，而忽略了其中一个原子核。这样，采用一级玻恩近似和几乎是正交的波函数来推导高速时 $1s \rightarrow ns$ 俘获过程的分析表达式，得到著名的近似关系[56]

$$\sigma_c(1s \rightarrow ns) \approx n^{-3} \tag{2.7-3}$$

类似的分析形式为[57]

$$\sigma_c(n_is \rightarrow ns) = \frac{2^{18}v^8Z_1^5Z_2^5}{5n^3n_i^5\left[v^4+2v^2\left(\frac{Z_2^2}{n_i^2}+\frac{Z_1^2}{n^2}\right)+\left(\frac{Z_2^2}{n_i^2}-\frac{Z_1^2}{n^2}\right)\right]^5}(\pi a_0^2) \tag{2.7-4}$$

Z_1 和 Z_2 分别是入射粒子和靶核电荷，a_0 是玻尔半径．(2.7-4)式的俘获截面 σ_c 既对主量子数为 n_i 的靶原子壳层的所有基态取平均，又对主量子数为 n 的入射粒子最初为空壳层的所有终态取和。如果考虑完整的相互作用势，对 OBK 近似式(2.7-4)加以修正，可使其适用的速度范围加宽 $(v \geqslant v_0)$．当然在很高速度下应计及电荷转移过程中的相对论效应．在低速时(即 $v < v_0$)，玻恩近似不适用，但畸变波方法仍然有效．不过，此时还可用另一种处理电子俘获问题的方法，就是数值解与时间有关的哈密顿或薛定谔方程[58]，或者用蒙特-卡罗 (Monte-Carlo) 经典轨迹法[59]．图 2.7-2 给出 20 千电子伏P-H 对头碰中电子密度的等强度图，清楚地显示

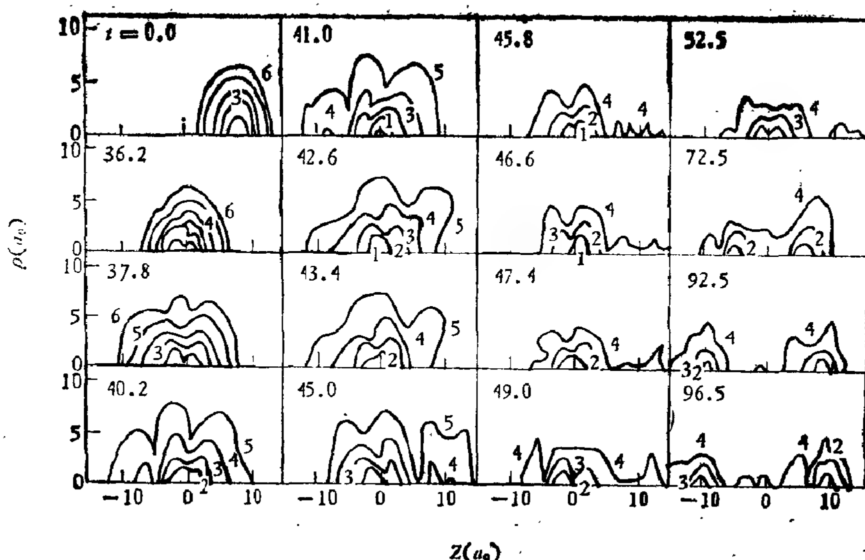


图 2.7-2　能量 20 千电子伏 P-H 对头碰中电子密度的等强度图．t 为逃逸时间，单位 10^{-17} 秒．从一根线到另一根线电子密度改变 10 倍[18]

了电荷转移、靶激发和电离的几率随时间的变化．

这种质子俘获氢原子中电子的最简单情况并没有令人满意地解决．如果是重元素靶，情况就很复杂，它涉及到多重态的形成和靶原子内壳层电子的俘获，而留下内壳空穴，结果对靶激发的贡献很大．(2.7-4) 式表明入射粒子速度足够高时，从靶原子内壳层俘获电子是主要的．至今，对于入射粒子是多电子系统的复杂情况，还没有任何理论严格处理．早期对裂变产物在气体中的电子俘获进行过粗略的估计[2]．此时应考虑入射粒子高电离电荷对靶电子的扰动．假定

$$Q < \begin{cases} Z_2^*, & v < v_e \\ v/v_0, & v \gtrsim v_e \end{cases} \tag{2.7-5}$$

q 和 Z_2^* 分别是相对于靶电子的入射粒子和靶原子的有效（屏蔽）电荷，v_e 为电子轨道速度．这意味着在慢的重离子碰撞中，靶电子沿着瞬时形成的准分子轨道运动而不能得到 OBK 截面．由于重离子电荷状态与重靶原子的原子数相等，微扰法或玻恩近似法已

不再适用，与时间有关的薛定谔方程解又太复杂，效果也不好．所以还是采用半经验方法把简单碰撞的电子俘获基本结果推广到任何重离子系统．方程（2.7-4）推广到重离子系统时可把 Z_1^5 分成 $q^2Z_1^3$，并引进束缚能 $E_{i,f}$ 代替量子数 $n_{i,f}$，得[60]

$$\sigma_c = \frac{8.53\times10^{-16}Q^2E_i^{5/2}E_f^{3/2}E_k}{[E_k^2+2E_k(E_i+E_f)+(E_i-E_f)^2]^5}\ 厘米^2 \tag{2.7-6}$$

式中 E_k 表示具有入射粒子速度 v 的电子动能，E_i 和 E_f 表示获取前后转移电子的束缚能（式中所有的能量单位为电子伏特）．对一个电子的系统，式（2.7-6）和（2.7-4）是一样的．束缚能可从哈特里-福克计算中得到，对于中性的靶原子已经列成表（见文献[6]），对于入射粒子任何电子结构均可以计算出来[62]，因此，（2.7-6）式相当有用．当然，实际应用时，还要计算部分填满壳层的俘获，需知道子壳层转移截面．况且，OBK 近似机理代表着单次直接俘获过程，而没有考虑靶和已经俘获的电子之间的相互作用，这些后效应会影响重靶原子的内壳层俘获，从而减少了俘获对入射粒子电荷终态的贡献，因为束缚能降低了．在离子-固体相互作用的实验中，还观察到多电子俘获，很大的电荷交换几率以及俘获后入射粒子激发到很高的量子态，甚至连续区和里德伯（Rydberg）态．这些都是尚未解决的问题．

离子和原子碰撞中的电子损失是一个电离过程，即是，能量传给离子中的电子而使电子逃逸．根据自由碰撞近似假设[2]，在靶电子轨道大于离子丢失的电子的轨道时，电子和靶核对入射粒子的电离效应彼此独立．因此，当入射速度同 v_0 相比足够大，也即，在 $\frac{b}{\lambda\!\!\!^{-}} \ll 1$时，束缚力可以忽略（此处 $\lambda\!\!\!^{-}$ 为$\frac{\lambda}{2\pi}$，λ 为德布罗意波长，b 为碰撞直径）．那么，一个电子的损失截面是由处在静止状态的“自由”电子和电荷为 q_T 速度为 v 的重粒子碰撞中能量转移大于 $\frac{1}{2}m_ev_e^2$ 的截面给出的

$$\sigma_e^l = 4\pi a_0^2q_T^2[v_0^2/(v_ev)]^2\{1-[v_e/(2v)]^2\}, \tag{2.7-7}$$

$$v_e \leqslant 2v$$

能量转移上限由 $2m_ev^2$ 给出. 因此, 将 σ_e^i 对离子中所有轨道速度 $v_e \leqslant 2v$ 的电子取和就得每个离子总损失截面. 采用最简单的托马斯-费米模型来估计速度分布 $A^{\frac{2}{3}}/v_0$, (2.7-7) 式积分可得

$$\sigma_l = \pi a_0^2 Q_2^2 Z_1^{1/3}(v_0/v^*)^3 \tag{2.7-8}$$

v^* 是离子处在基态时束缚最松的电子的轨道速度, 接近于 v; Q_2 表示靶原子的有效电荷数, 又叫平均平衡电荷, $Q_2 = Z_2^{1/3}\dfrac{v}{v_0}$, 它是在离子和靶交互作用时产生的. 若用 $v_0 Q_1 Z_1^{-1/3}$ 近似表示 v^*, 方程 (2.7-7) 变成

$$\sigma_l = \pi a_0^2 Z_2^{2/3} Z_1^{4/3} Q_1^{-3}(v/v_0)^2 \tag{2.7-9}$$

离子-原子碰撞的电子损失的研究, 近年来有了较大的发展, 主要是内壳层激发和电离在不同的区域有了不同的处理方法. 如 $Z_1 \ll Z_2$ 时, 可用微扰法, 得到与实验符合的结果. 特别是 K 壳层电子的电离截面有了精确的计算. 图 2.7-3 是电离截面的典型特征. 其中 E_i 是被电离电子的束缚能. 值得注意的是, 由于作用在入射离子的电子上的有效电荷是 q_T [见 (2.7-8) 式], 所以, 图中的 Z_1^2 应为 q_T^2 所替代. 而且, q_T 在碰撞期间是变化的, 使得图 2.7-3 中曲线的通用性受到一定影响. 但是, 如果电离的主要贡献起因于碰撞参数

$$b_l \simeq \hbar v/E_e \tag{2.7-10}$$

且 q_T 是离靶核距离 $R = b_l$ 处的电荷, 那么, 碰撞中移去电子具有速度 $v_i \simeq v$, 且

$$b_l \simeq R, \quad v_e \simeq v \tag{2.7-11}$$

也即是说, 碰撞参数数量级是入射粒子电子的壳层半径. 大多数情况下, R_e 足够大, 给出比较小的有效电荷. 这又使方程 (2.7-5) 的条件得到满足, 或者确证了图 2.7-3 中所表示的条件. 当然, 带电入射粒子使靶电子极化和电离也值得考虑. 不过, 由于电荷交换过程多数是处理速度 $v_e \simeq v$ 的入射粒子电子的损失, 故在近碰处理时出现的某些问题可以避免, 如, 大的有效电荷 q_T, 大的扰动和

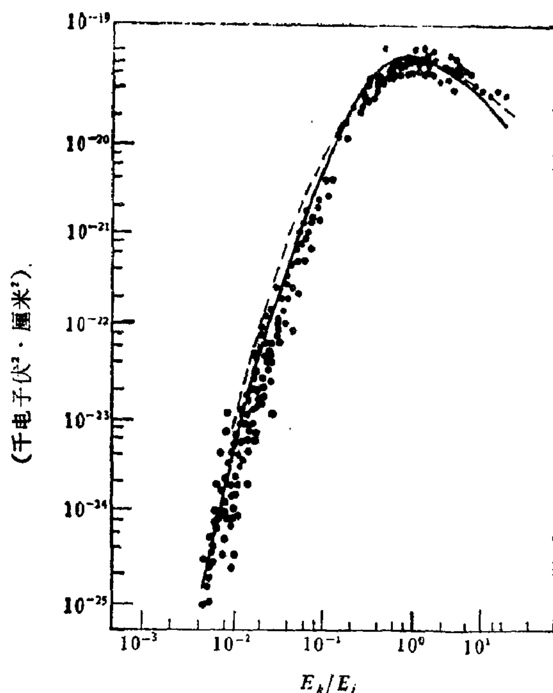


图 2.7-3 束缚能 E_i 的两个K壳电子电离截面 σ_i 的普适图，入射粒子速度为 v，(低 Z_1)同约化的碰撞能量 $E_k = \frac{1}{2} m_e v^2$ 的关系*)

绝热效应等.

二 平衡电荷态的分布

当电荷为 Q_1 的离子束穿过靶物质时，其电荷成分由于上述各种俘获和损失电子的过程而发生变化. 对每一个靶厚 x，则可相应地观察到相对电荷态的布居 $Y_{Q_1}(x)$，满足如下微分方程

$$\frac{dY_{Q_1}(x)}{dx} = \sum_{Q_1' \neq Q_1} \{\sigma(Q_1', Q_1) Y_{Q_1'}(x) - \sigma(Q_1, Q_1') Y_{Q_1}(x)\} \tag{2.7-12}$$

*) 取自 J. D. Garcia, R. J. Fortner and T. M. Kavanagh, *Rev. Mod. Phys.*, **45**, 111(1973).

Y_{Q_1} 表示离子携带电荷 Q_1 的分数且满足归一化 $\sum_{Q_1} Y(Q_1)=1$. Q_1 和 Q_1' 为离子碰撞前后的电荷．但是，当靶厚增加到一定程度时，电子损失和电子俘获相当，就达到了平衡．此时电荷状态的分布同入射束打到靶上电荷状态的初始分布无关．于是有

$$\sum_{Q_1'} F(Q_1')\sigma(Q_1', Q_1) = F(Q_1) \sum_{Q_1'} \sigma(Q_1, Q_1'), \quad (Q_1' \neq Q_1) \tag{2.7-13}$$

$F(Q_1)$ 为平衡因子．它可由 (2.7-1) 和 (2.7-2) 式给出．对一定的平衡电荷态分布，定义平均电荷为

$$\bar{Q}_1 = \sum Q_1 F(Q_1) \tag{2.7-14}$$

及宽度参数(标准偏差)为

$$d = \left[\sum_{Q_1'} (Q_1 - \bar{Q}_1)^2 F(Q_1)\right]^{1/2} \tag{2.7-15}$$

当 $F(Q_1)$ 是高斯分布

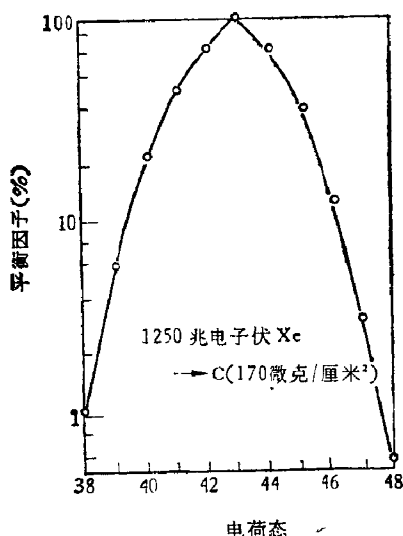


图 2.7-4　1250 兆电子伏 Xe 离子在碳箔中的平衡电荷分布*)

*) 取自 *K. Blasche, R. Steiner, and B. Franzke, GSI Nachrichten, Darmstadt, No. 12—76, 1976.*

$$F(Q_1) = d(2\pi)^{1/2}\exp[-(\bar{Q}_1 - Q_1)^2/2d^2] \qquad (2.7\text{-}16)$$

宽度参数 d 和电荷分布的半宽度有 $\mathrm{FHWH} = 2d(2\ln 2)^{1/2}$ 的关系. 图 2.7-4 是 1250 兆电子伏 Xe 离子在碳箔上的平衡电荷分布,呈高斯型[60]. 但是,大多数靶中,这种分布是不很对称的,如图 2.7-5 所示的 ^{127}I 离子在金靶中的电荷分布. 图中还包含着碘离子在碳靶和部分气体靶中的电荷分布以便比较,穿过气体靶后电荷态分布不对称性更为明显[63].

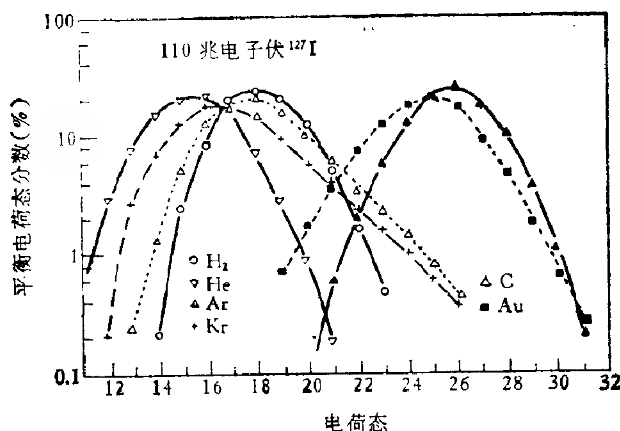


图 2.7-5 110 兆电子伏碘离子在几种靶样中的平衡电荷分布[63]

完整地精确地计算电荷态分布 $F(Q_1)$ 是比较困难的. 纵使用 (2.7-2) 式仍有较大的偏差.通常用两种半经验方法: (1) 取给定离子和靶样品在几种速度下实验的平衡分布,进行内插和外推得到 $F(Q_1, v)$;(2)观察 $F(Q_1)$形状的趋势和规律性以及平均电荷 $\bar{Q}_1$ 来预言任意情况下的电荷分布.前者的优点是只需原始数据且部分地包括了壳层效应和分布的不对称性,但不能推演到其它碰撞系统;后者则因假定了分布是高斯型,宽度 d 和平均电荷 $\bar{Q}_1$, 往往同实验偏离较大.

实验表明平均平衡电荷 $\bar{Q}_1(v, Z)$具有规律和平滑的特性,如图 2.7-6 所示. 根据托马斯-费米统计模型可得平均平衡电荷的半经验关系

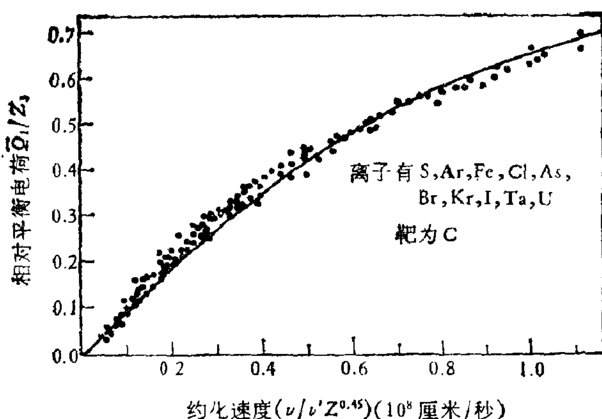


图 2.7-6　重离子穿过固体靶(碳)的相对平均平衡电离同离子约化速度 $v/(1.65v_BZ^{0.45})$ 的关系[64]

$$\frac{\bar{Q}_1}{Z_1}=\frac{v}{v_BZ_1^{2/3}},\quad \bar{Q}_1<\frac{Z_1}{2}. \tag{2.7-17}$$

$\bar{Q}_1/Z_1=f\left(\frac{v}{v_BZ^{2/3}}\right)$ 有适应不同情况的表达方式. 例如，当速度较高时，采用二参数的半经验关系[64]，

$$\frac{\bar{Q}_1}{Z_1}=1-A_0\exp\left(\frac{-v}{v_BZ_1^r}\right),\quad v\geqslant v_B, \tag{2.7-18}$$

其中 A_0 和 r 是可调参数，其值可近似取为 $A_0\simeq 1$ 和 $r\simeq 2/3$. 若是固体靶，则可采用三参数关系[65]

$$\frac{\bar{Q}_1}{Z_1}=[1+(Z_1^{-\alpha}v/v')^{-1/k}]^{-k},\ Z_1\geqslant 16, \tag{2.7-19}$$

式中 $\alpha=0.45$, $k=0.6$, 及 $v'=1.65v_0$.

实验上，常常把 $\bar{Q}_1$ 叫做“有效”平衡电荷，用 Z_1^* 表示[见(2.2-3)式]. 瓦德 (Ward) 等人[66]根据五种离子在六种不同金属中的能量损失测量，给出 $v>2v_B$ 时 Z_1^* 的表达式

$$Z_1^*=Z_1\left[1-A(Z_1)\exp\left(\frac{-0.879}{v_BZ_1^{0.65}}\right)\right], \tag{2.7-20}$$

$$A(Z_1)=1.035-0.4\exp(-0.16Z_1)$$

当 Z_1^* 已知时，通过贝特公式可把速度为 v 的入射粒子 A 的能量

损失外推到速度相同的 B 粒子在同样靶物质中的能量损失，即

$$\frac{1}{Z_A^{*2}}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{Z_A,v}=\frac{1}{Z_B^{*2}}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{Z_B,v} \tag{2.7-21}$$

这就是（2.4-64）式，如果已给出质子的数据，则可用

$$\frac{1}{Z_1^{*2}}\left(\frac{dE}{dx}\right)_{Z_1,v}=\left(\frac{dE}{dx}\right)_{P,v}\frac{1}{Z_P^{*2}}, \tag{2.7-22}$$

而质子的有效平衡电荷（Z_P^*）通常由

$$(Z_P^*)^2=[1-\exp(-150E_P)]\exp[-0.835\exp(-14.5E_P)] \tag{2.7-22a}$$

给出，式中 E_P 是质子能量(单位是兆电子伏)．氦离子的有效电荷由瓦德[66]的半经验表达式给出，

$$(Z_{He}^*)^2=4-3.04\exp(-1.77E_{He}) \tag{2.7-23}$$

E_{He} 是氦离子能量（单位：兆电子伏）．这个关系式只有在 $E_{He}>$

表 2.7-1　在速度相同时质子和氦离子"有效"平衡电荷及其比值

E_P（兆电子伏）	$(Z_P^*)^2$	E_{He}（兆电子伏）	$(Z_{He}^*)^2$	$(Z_{He}^*/Z_P^*)^2$
0.10	0.822	0.4	2.502	3.044
0.15	0.910	0.6	2.949	3.241
0.20	0.955	0.8	3.262	3.416
0.25	0.978	1.0	3.482	3.560
0.30	0.989	1.2	3.637	3.677
0.35	0.995	1.4	3.745	3.764
0.40	0.998	1.6	3.821	3.829
0.45	0.999	1.8	3.874	3.878
0.50	0.999	2.0	3.912	3.916
0.55	1.000	2.2	3.938	3.983
0.60	1.000	2.4	3.957	3.957
0.65	1.000	2.6	3.970	3.970
0.70	1.000	2.8	3.979	3.979
0.75	1.000	3.0	3.985	3.985
0.80	1.000	3.2	3.989	3.989
0.85	1.000	3.4	3.993	3.993
0.90	1.000	3.6	3.995	3.995
0.95	1.000	3.8	3.996	3.996
1.00	1.000	4.0	3.997	3.997

0.4 兆电子伏时成立. 根据(2.7-22a)式和(2.7-23)式所计算的质子和氦离子的"有效"电荷及其比值列于表 2.7-1.

三 原子跃迁和固体中电荷平衡

离子-原子碰撞使入射粒子产生丰富的激发态,影响着固体中离子电荷的形成. 如果产生激态的寿命长于平均碰撞时间, 即 $\tau \gg \Delta t_c$, 由原子跃迁的激态衰变就不能影响电子俘获和损失的平衡. 如果 $\tau \lesssim \Delta t_c$, 则会影响. 图 2.7-8 示出入射粒子空穴产生和消亡的主要过程. 值得注意的是辐射和俄歇 (Auger) 跃迁同电子俘获竞争. 快速入射离子从靶原子内壳层俘获电子而进入较高

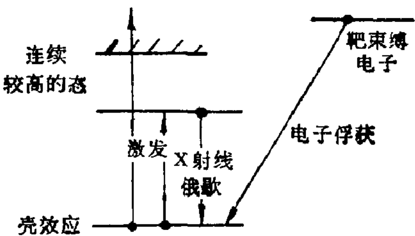


图 2.7-7 离子穿过固体靶时内壳空穴产生和消亡示意图

的激发态. 结果,入射粒子和靶原子均会发生原子跃迁. 不过,直到最近[67], 发现快速粒子的 K-X 射线产额随 Z_2 的振荡变化(图 2.7-8), 才引起人们对电子俘获和原子跃迁之间联系的重视,因为这是两种效应竞争的结果.

图 2.7-9 表示运动离子在固体内和固体外的特定激态分数的建立和衰变. 激发能级由于碰撞而增加, 在靶足够厚时达到一个平衡值 N_∞. 当离子从靶箔出来时,激发部分衰变,产生俄歇和 X 射线跃迁. 如果把所有路径长度用飞行时间 t 表示, 则去激 X 射线产额由

$$Y(t_0) = N_\infty(t_0 + \langle\tau_a\rangle - \langle\tau_i\rangle)/\tau_R \qquad (2.7\text{-}24)$$

表示, t_0 对应于平衡时的靶厚度, $\langle\tau_a\rangle$ 和 $\langle\tau_i\rangle$ 分别表示态建立和衰变时间, τ_R 是态的辐射寿命. 如果忽略级联效应, $\langle\tau_a\rangle$ 等于孤立原子俄歇和 X 射线跃迁态的总寿命 τ, 时间 $\langle\tau_i\rangle$与各种产生和

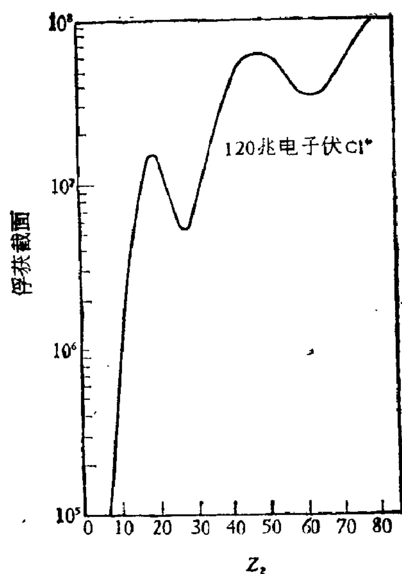


图 2.7-8　120 兆电子伏氯离子俘获电子进入 K 壳层的截面随靶原子数 Z_2 的变化[66]

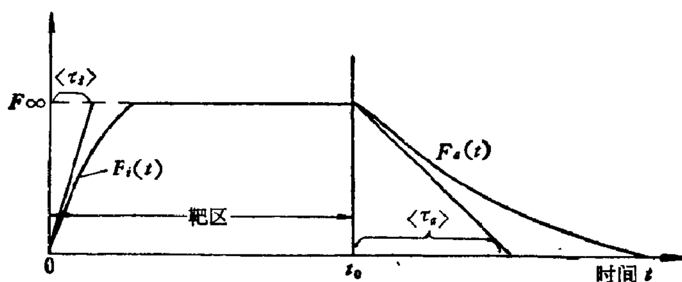


图 2.7-9　固体靶箔内外离子激发到一定状态分数示意图

衰变模式的总截面有关

$$\begin{aligned}\langle\tau_i\rangle &\simeq (\rho v\sigma_t)^{-1},\\ \sigma_t &= \sigma_l + \sigma_c + (\rho v\tau)^{-1}\end{aligned}\qquad(2.7\text{-}25)$$

$(\rho v\tau)^{-1}$ 是原子跃迁截面．在碰撞时间 $\Delta t_c = [\rho v(\sigma_l + \sigma_c)]^{-1}$ 时，(2.7-24) 式有

$$Y(t_0) \simeq \begin{cases} N_\infty t_0/\tau_R & \Delta t_c \gg \tau \\ N_\infty(t_0 + \tau)/\tau_R & \Delta t_c \ll \tau \end{cases}\qquad(2.7\text{-}26)$$

相应的平衡分数为

$$F_{\infty}=\sigma_l/\sigma_t=\begin{cases}\sigma_l v\tau & (\Delta t_c\gg\tau)\\ \sigma_l(\sigma_l+\sigma_c)^{-1} & (\Delta t_c\ll\tau)\end{cases}\quad(2.7\text{-}27)$$

显然，当俘获截面为主时，$\sigma_t\simeq\sigma_c$，会有 $F_{\infty}\simeq\sigma_l/\sigma_c$. 图 2.7-10 是氯离子通过固体时 k 壳空穴产生和消亡截面的定量分析，证明俘获截面 σ_c 是占统治地位.而俘获截面大小强烈地影响着 X 射线产生:例如，当 σ_c 大时，许多空穴被破坏了，因而原子跃迁就减少了.

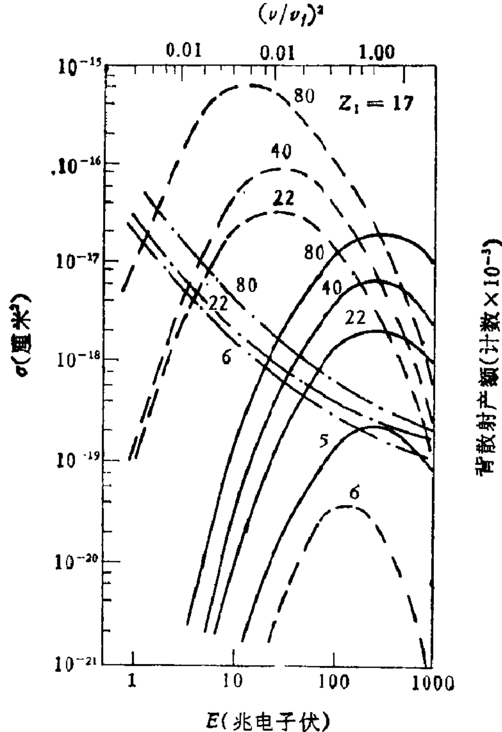


图 2.7-10 氯离子通过固体时 k 壳层空穴产生和消亡截面同入射粒子能量的关系[67]. 曲线标记的数字是靶原子数.
——电子损失；— — —电子俘获；— · —原子跃迁有效截面 $(\rho v\tau)^{-1}$

另外，辐射电子俘获同非辐射库仑俘获是相竞争的过程，这类问题，包括俄歇电子产生机理，我们在第四章中将会讨论.

参 考 文 献

[1] N. Bohr, *Phil. Mag.*, 25, (6), 10(1913).

[2] N. Bohr, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **18**, No. 8(1948).
[3] H. A. Bethe, *Ann. Phys.*, **5**(5), 325(1930).
[4] H. A. Bethe, *Z. Phys.*, **76**, 293(1932).
[5] H. A. Bethe, *Phys. Rev.*, **89**, 1256(1953).
[6] J. Lindhard, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **28**, No. 8(1954).
[7] J. Lindhard and M. Scharff, *Phys. Rev.*, **124**, 128(1961).
[8] J. Lindhard, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **34**, No. 4(1965).
[9] O. B. Firsov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **32**, 1464(1957), and **33**, 696(1958).
[10] O. B. Firsov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **36**, 1517(1959).
[11] J. Lindhard, M. Scharff and H. E. Schiøtt, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **33**, No. 14(1963).
[12] L. C. Northcliff and R. F. Schilling, *Nucl. Data. Tables*, **7A**, 233(1970).
[13] Hartree, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **24**, 89(1927).
[14] L. H. Thomas, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **23**, 542(1926).
[15] E. Fermi, *Zeits f. Physik*, **48**, 73(1928).
[16] P. Gombás, Die Statistische Theorie des Atoms und ihre Anwendungen, Wien (1949).
[17] J. Lindhard, Vibeke Nielsen, and M. Scharff, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **36**, No. 10(1968).
[18] E. Bonderup, Lecture Notes on "Penetration of Charged Particles Through Matter", Trykt pã Fysisk Instituts Trykkeri, Aarhus Universitet (1981). p149
[19] Hans E. Schiøtt, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **35**, No. 9(1966).
[20] S. Kalbitzer, H. Oetzman, H. Grahman, and A. Feuerstein, *Z. Phys.*, **A278**, 223(1976).
[21] W. D. Wilson, L. G. Haggmark, and J. P. Biersack, *Phys. Rev.*, **B15**, 2458 (1977).
[22] J. S. Briggs and A. P. Pathak, *J. Phys. C.*, **6**, L155(1973).
[23] J. Bøttiger and F. Bason, *Rad. Effects*, **2**, 105(1969).
[24] I. M. Cheshire, G. Dearnaley and J. M. Poate, *Phys. Lett.*, **27A**, 304(1968).
[25] A. H. El-Hoshy, and J. F. Gibbons, *Phys. Rev.*, **173**, 454(1968).
[26] P. Hvelplund, and B. Fastrup, *Phys. Rev.*, **165**, 408(1968).
[27] I. M. Cheshire, G. Dearnaley and J. M. Poate, *Proc. R. Soc.*, **A311**, 47(1969).
[28] F. Bloch, *Ann. Phys.*, **16**(5), 287(1933); *Z. Phys.*, **81**, 363(1933).
[29] A. Crispin and G. N. Fowler, *Rev. Mod. Phys.*, **42**, 290(1970).
[30] M. C. Walske, *Phys. Reo.*, **88**, 1283(1952); *ibid.*, **101**, 940(1956).
[31] S. D. Softky, *Phys. Rev.*, **123**, 1685(1961); S. Matteson, E. K. L. Chau, and D. Powers, *Phys. Rev.*, **A14**, 169(1976).
[32] J. F. Ziegler, W. K. Chu, and J. S.-Y. Feng, *Appl. Phys. Lett.* **27**, 387(1975).
[33] J. Lindhard, *Nucl. Instrum. Methods*, **132**, 1(1976).
[34] J. C. Ashley, W. Brandt and R. H. Ritchie, *Phys. Rev.*, **B5**, 2393(1972); *ibid.*, **A8**, 2402(1973).
[35] J. D. Jackson and R. L. McCarthy, *Phys. Rev.* **B6**, 4131(1972).
[36] H. H. Heckman and P. J. Lindstrom, *Phys. Rev. Lett.*, **22**, 871(1969).
[37] H. H. Andersen, H. Simonsen and H. Sørensen, *Nucl. Phys.*, **A125**, 171(1969).
[38] W. Brandt, A. Ratkowski and R. H. Ritchie, *Phys. Rev. Lett.*, **33**, 1325(1974)

and **35**, 130(E) (1975).

[39] W. Brandt and R. H. Ritchie, *Nucl. Instrum. Methods*, **132**, 43(1976).

[40] D. S. Gemmell, J. Remillieux, J. C. Poizat, M. J. Gaillard, R. E. Holland and Z. Vager, *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 1420(1975).

[41] D. S. Gemmell, J. Remillieux, J. C. Poizat, M. J. Gaillard, R. E. Holland and Z. Vager, Int. Conf. on Atomic Collisions in Solids, Amsterdam (September 1975) Paper E3.

[42] J. W. Tape, W. M. Gibson, J. Remillieux, R. Laubert and H. E. Wegner, Int. Conf. on Atomic Collisions in Solids, Tmsterdam (Sept. 1975) Paper E5

[43] M. D. Brown and C. D. Moak, *Physics Raview*, **B6**, 90(1972).

[44] F. Ziegler and W. K. Chu, *At. Data Nucl. Data Tables*, **13**, 463(1974).

[45] J. Lindhard and A. Winther, *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.*, **34**, No. 4 (1964).

[46] W. H. Bragg and R. Kleeman, *Phil. Mag.*, **10**, S318(1905).

[47] W. Pietsch, U. Hauser and W. Newwirth, *Nucl. Instrum. Methods*. **132** 79 (1976).

[48] H. Grahmann and S. Kalbitzer, *Nucl. Instrum. Methods*, **132**, 119(1976).

[49] N. Bohr, *Phil. Mag.* **30**, 581(1915).

[50] J. M. Harris and M-A. Nicolet, *Phys. Rev.* **B11**, 1013(1975).

[51] J. Lindhard and M. Scharff, *Mat. Fys. Medd. Dam. Vid. Selsk.*, **27**, No. 15 (1953).

[52] E. Bonderup and P. Hvelplund, *Phys. Rev.*, **A4**, 562(1971).

[53] W. K. Chu, *Phys. Rev.*, **A13**, 2057(1976).

[54] L. Landau, *J. Phys.*, **8**, 201(1944).

[55] G. Deconninck and Y. Fouilhe, In "Ion Beam Surbace layer Analysis" (O. Meyer, G. Linker and F. Käppelar, eds), Plenum Press, New York, p. 87(1976).

[56] J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.*, **31**, 349(1928).

[57] H. C. Brinkman and H. A. Kramers, *Proc. Acad. Sci., Amsterdam*, **33**, 973 (1930).

[58] V. Maruhn-Rezwani, N. Grün, and W. Scheid, *Phys. Rev. Lett.*, **43**, 512 (1979).

[59] A. Salop, *J. Phys.*, **B12**, 919(1979).

[60] Hans D. Betz, in "Atomic Physics, Accelerators" (P. Richard, eds.) Academic Press, INC. (London) LTD. p. 73(1980).

[61] C. C. Lu, T. A. Carlson, F. B. Malik, T. C. Tucker, and C. W. Nestor, *Atom. Data*, **3**, 1(1971).

[62] J. P. Desclaux, *Comp. Phys. Comm.*, **9**, 31(1975).

[63] S. Datz, C. D. Moak, H. O. Lutz, L. C. Northctille, and L. B. Bridwell, *Atom. Data.*, **2**, 273(1971).

[64] H. D. Betz, *Rev. Mod. Phys.*, **44**, 465(1972).

[65] V. S. Nikolaev and I. S. Dmitriev, *Phys. Lett.*, **28A**, 277(1968).

[66] D. Ward, J. S. Foster, H. R. Andrews, I. V. Mitchell, G. C. Ball, W. G. Davies and G. J. Costa, AECL-5313, Chalk River, Canada (1976).

[67] F. Bell and H. D. Betz, *J. Phys.*, **B10**, 483(1977).

第三章 离子束分析固态材料的组分和结构

核技术的应用促进了其它学科，特别是材料科学的发展．一个明显的例证，是诸多的和粒子同固体相互作用有关的碰撞现象，这些现象为研究材料组分提供了各种各样的微探针分析方法和技术．当粒子束(离子束、电子束和光子束合称三束)轰击靶物质后，有各种可能的碰撞过程和产生相应的分析方法．如：俄歇电子谱学（AES），离子束感生光发射（BILE），电子微探针显微镜(EPM)，化学分析的电子能谱仪(ESCA)，化学分析的离子束谱学（IBSCA），离子感生俄歇电子谱学（IIAES），离子感生光发射（IILE），离子感生 X 射线发射（IIXE），离子探针显微镜(IPM)，红外谱学（IRS），离子散射谱学（ISS），低能电子衍射(IEED)，低能电子散射（LEES），LMSA（Le Gressus-Massignon-Sopizet-Anger）中能离子散射（MEIS），光电子谱学（PES），粒子感生 X 射线发射（PIXE），瞬发辐射分析（PRA），卢瑟福背散射（RBS），反射高能电子衍射（RHEED），中性和离子激发辐射分析表面组分（SCANIR），扫描电镜（SEM），二次高能电子衍射（SHEED），俄歇扫描电镜(SAM)和二次离子质谱(SIMS)等．这些微探针分析方法取决于探测碰撞中产生的特征信号．样品按照分析时是否受到侵蚀而分为"破坏性"的和"非破坏性"的．当然由于离子在物质中穿过，其路径上总会产生一些空位和间隙原子，最后聚集而形成缺陷，故这里所讲的"非破坏性"是指所产生的缺陷或杂质被控制在一定范围之内．本章主要叙述以离子束为探针的"非破坏性"分析方法，如卢瑟福背散射谱学、离子感生 X-射线发射谱和核反应方法．与激烈碰撞-溅射现象有关的方法，如二次离子质谱，俄歇电子谱学等将在下一章中讨论．

§ 3.1 离子背散射谱学

大角度弹性散射已广泛地应用于卢瑟福散射截面可适用的区域. 对一给定的粒子入射到靶上，这个区域就相当于碰撞最接近距离时所需的轰击能量范围. 此时，一方面原子上电子的屏蔽作用不大，另一方面原子核的短程相互作用也不显著. 当用轻的入射粒子（$Z_1 \leqslant 3$）打到静止靶上时，轰击能量范围一般是 100 千电子伏/原子单位 $\lesssim E \lesssim 1$ 兆电子伏/原子单位. 而且,靶原子也不能太轻,一般应 $Z_2 \geqslant 20$.对于许多小型加速器来说这种要求是能达到的. 从第二章的能量损失讨论中得知,在这些能量范围内,穿进固体的离子主要是通过与价电子或导电子气的相互作用而损失能量(即电子阻止),因此很难偏转,一直到发生近碰，使离子散射回来并沿"直线"路径回到表面,如图 3.1-1(a) 所示. 这一特点很重要，因为这时可以把背散射粒子的散射过程看成是单次碰撞事件,故可应用两体运动学来分析,即卢瑟福背散射(RBS). 若入射粒子能量增高，由于此时的弹性散射截面还包括了核的相互作用,所以背散射方法只适用于某些特殊的情况. 然而,这样的核反应方法还是有优点的,由于它的反应截面大,因此可以增加对特定杂质样品的灵敏度,并且由于入射粒子能量高,因此可以探知靶物质中的较深处.

随着入射粒子能量的降低，原子中的电子屏蔽效应变得重要起来,弹性散射截面开始偏离卢瑟福散射值. 同时,"核"对入射粒子能量损失的贡献使入射粒子的路径偏离直线方向,结果,使背散射粒子经过一系列的硬碰,如图 3.1-1(b) 所示. 如果入射粒子能量再降低(<10 千电子伏),又会出现单次碰撞条件，因为这时入射粒子只能穿透表面几个原子层,如图 3.1-1(c) 所示. 虽然在一些特定条件下,用库仑势可以近似地描述它们相互作用的特征,但对这种情况的弹性散射截面知道的并不确切，还有表面电荷交换过程以及中性化过程,使问题变得更加复杂. 但是,无论如何，低

能离子散射确是研究表面层的一个方法，而且可以定量地同已知表面组分的标准样品加以比较，不需要考虑散射截面和中性化几率．这个方法叫低能离子散射（LEIS）或叫离子散射谱学(ISS)．

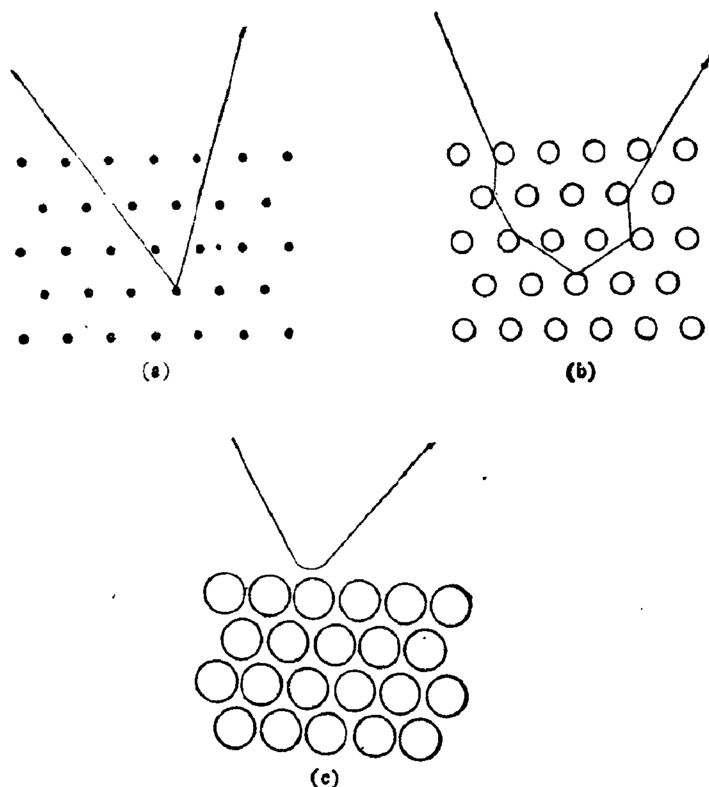


图 3.1-1 离子从固体靶上背散射轨迹示意图．
(a)“高”能量；(b)“中等”能量；(c)“低”能量

一 运动学因子和微分散射截面

在第一章引言中，我们已经根据能量和动量守恒原理导出了散射运动学因子．现在考虑如图 3.1-2 所示的大角散射．式(1.3-11b)、(1.3-12) 和 (1.3-13) 也适用于背散射情形,即背散射离子的能量 E_1 是质量 M_1，M_2 和实验室坐标系的散射角 θ 的函数．

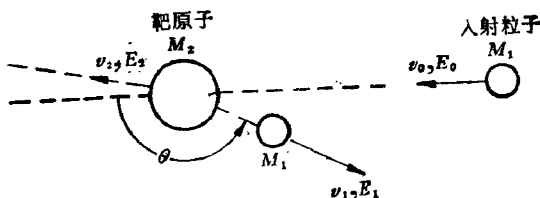


图 3.1-2 入射粒子和靶原子大角散射的示意图

这些方程重写如下:

$$\frac{E_2}{E_0} = \frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}\sin^2\frac{\theta_c}{2}$$

$$K = \frac{E_1}{E_0} = 1 - \frac{2M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}(1-\cos\theta_c) \qquad (3.1\text{-}1)$$

$$\tan\theta = \frac{\sin\theta_c}{\cos\theta_c + M_1/M_2}$$

其中K定义为运动学因子，θ_c 是质量中心系中的散射角. 于是用实验室坐标系散射角θ来表示碰撞前后入射粒子的能量比K为

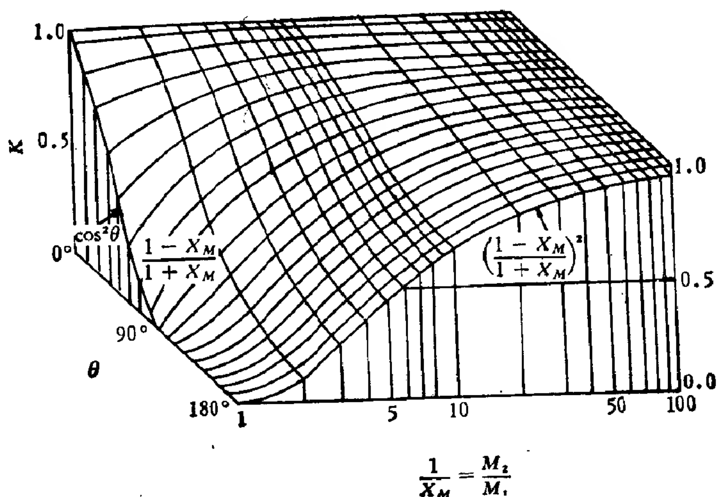


图 3.1-3 公式 (3.1-2b) 表示的运动学因子K与质量比 $X_M^{-1} = M_2/M_1$ 和散射角之间的关系

$$K = \frac{E_1}{E_0} = \left[\frac{M_1\cos\theta + \sqrt{M_2^2 - M_1^2\sin^2\theta}}{M_1 + M_2}\right]^2 \quad (3.1\text{-}2a)$$

$$= \left\{\frac{[1-(M_1/M_2)^2\sin^2\theta]^{1/2} + (M_1/M_2)\cos\theta}{1 + (M_1/M_2)}\right\}^2$$

$$(3.1\text{-}2b)$$

令质量比 $M_1/M_2 = x_M$，则K可用 x_M^{-1} 和θ给出，如图 3.1-3。因此，对任何 x_M，180° 时K取最小值，即

$$K_{\theta=180°} = \left[\frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1}\right]^2 = \left[\frac{1 - x_M}{1 + x_M}\right]^2 \quad (3.1\text{-}3)$$

当 $\theta = 90°$ 时，

$$K_{\theta=90°} = \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} = \frac{1 - x_M}{1 + x_M} \quad (3.1\text{-}4)$$

这说明K在 180° 的值是其在 90° 的值的平方．当入射粒子和靶原子核质量相等时($x_M = 1$)，散射角大于 90° 的K等于零；当散射角小于 90° 时，K随 $\cos\theta$ 增加．这意味着一个入射粒子同等于它质量的静止粒子碰撞，不可能弹回来，只会向前．当$M_1 > M_2$时，也是如此．因此，这在两种情况下，不可能有背散射．

在背散射谱学中，我们主要感兴趣的是接近 180° 的散射．为方便起见，引入 $\delta = \pi - \theta$，并用弧度表示之．这样与即表示θ对 180° 的偏离，于是，运动学因子可近似地用δ展开的第一项表示

$$K \simeq \left(\frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1}\right)\left(1 + \frac{M_1}{M_2}\delta^2\right) = \left(\frac{1 - x_M}{1 + x_M}\right)^2(1 + x\delta^2)$$

$$(3.1\text{-}5)$$

这个方程表明θ自 180° 略减小，而K沿着图 3.1-2 的前沿增加．随着θ偏离 180°，K按δ^4增加，并且正比于 $x_M = \frac{M_1}{M_2}$．当这个比值很小时，因子 $[(1 - x_M)/(1 + x_M)]^2$ 近似为 $(1 - 4x_M)$，故在图 3.1-2 的右角，运动学因子K可近似表述为

$$K \simeq 1 - 4x_M + \delta^2 x_M \quad (3.1\text{-}6)$$

此式在用θ和 x_M 值估计K时非常方便．由于它同背散射谱学关

系密切，人们已经将K和 δ^2 值制成表，便于查阅[1].

方程 (3.1-2) 包含着背散射谱能探知原子质量的基础. 假定已知入射粒子的初能量 E_0 和质量 M_1，在已知角度 θ 测量弹性散射事件的能量为 E_1，根据 (3.1-2b) 式可以算出靶原子质量 M_2. 这就是“反射式”质谱学.

在实际测量中，若靶包含两种原子，其质量为 ΔM_2，则在测量碰撞之后的入射粒子能量 E_1 时，ΔM_2 产生的能量差 ΔE_1 应尽可能大. 从图 3.1-2 可知，当 M_1 固定时，ΔM_2 的变化使K变化最大处是在 $\theta = 180°$. 因此，把探测器放在 $\theta = 180°$ 的位置是最好的. 但真要把探测器放到 180° 位置，又会阻挡住入射粒子的路径. 所以，实验时常把探测器放在 170° 附近. 如果采用环形探测器，散射角可以很接近 180°，入射束可以通过其中心孔而打到靶上.

ΔE_1 和 ΔM_2 之间的关系可表示为

$$\Delta E_1 = E_0\left(\frac{dK}{dM_2}\right)\Delta M_2 \tag{3.1-7}$$

当 $\theta = 180°$，即 $\theta = \pi - \delta$ 时，K很接近式 (3.1-5)，因此

$$\frac{\Delta E_1}{E_0} = \frac{1 - x_M}{(1 + x_M)^3}\left[4(1 + x_M\delta^2) - \delta^2(1 - x_M)\right]x_M\frac{\Delta M_2}{M_2} \tag{3.1-8}$$

大多数情况是 $M_2 \gg M_1$，则上式简化为

$$\Delta E_1 = E_0(4 - \delta^2)\frac{M_1}{M_2^2}\Delta M_2 \tag{3.1-9}$$

实用的探测器系统都有一定的分辨率，如果 ΔE_1 低于这个极限，则这两个质量不同的元素不可能区分开. 为了获得较好的质量分辨率，就要尽可能增大 ΔM_2. 要满足这一点可采用下列方法:

(i) 增加入射粒子能量 E_0;

(ii) 利用较大质量的入射粒子(但应注意当 M_1 大于 M_2 时不会有背散射);

(iii) 散射角应接近 180° (使 δ 很小).

单就质量分辨率而言，轻原子的靶比重原子的靶好.

(1.3-10) 和 (2.2-36) 式所表示的卢瑟福散射截面公式，是建立在入射粒子和靶原子弹性碰撞基础上的. 图 3.1-4 给出了一束能量为 E_0 的粒子与固定靶原子碰撞，在单位时间内散射到单位立体角的几率，于是有[2]

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=\left(\frac{Z_1Z_2e^2}{2E_0\sin^2\theta}\right)^2$$

$$\times\frac{\left\{\cos\theta+\left[1-\left(\frac{M_1}{M_2}\sin\theta^2\right)\right]^{1/2}\right\}^2}{\left[1-\left(\frac{M_1}{M_2}\sin\theta\right)^2\right]^{1/2}} \qquad (3.1-10)$$

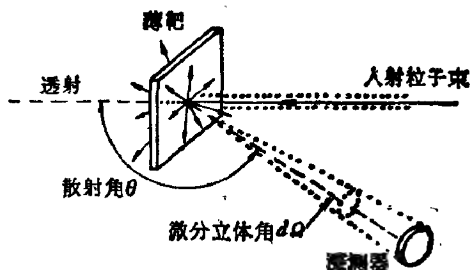


图 3.1-4　测量微分散射截面示意图

当 $M_2\gg M_1$ 时，上式近似为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=1.295\left(\frac{Z_1Z_2}{E_0}\right)^2\left[\csc^4\left(\frac{\theta}{2}\right)-2\left(\frac{M_1}{M_2}\right)^2+\cdots\right]$$

这就是 (1.3-11a) 式. 其中 E_0 的单位是兆电子伏 (MeV).

平均散射截面 σ 定义为

$$\sigma=\frac{1}{\Omega}\int\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega \qquad (3.1-11)$$

Ω 为探测器所张的立体角.

二　深度刻度

散射粒子的最后能量不仅与靶原子质量有关，而且与散射事件发生的深度有关，后者是由物质的阻止能力确定的. 为了说明

这个问题，先把如何在实验上得到背散射谱介绍一下.

背散射实验装置如图 3.1-5 所示，离子源产生一个能量为 E_0 的近似单能离子束. 一般用 $^4He^+$ 离子束（能量为 2.0 兆电子伏，束流为 10—100 微安，束斑大小约为 1 毫米的直径）作为分析束轰击样品. 轰击后绝大多数 $^4He^+$ 离子停止在样品之中（如果样品不太薄），只有很少粒子（大约 $<10^{-4}$）从样品表面返回，其中一小部分进入探测器，如图 3.1-4 所示. 从探测器上输出一个脉冲信

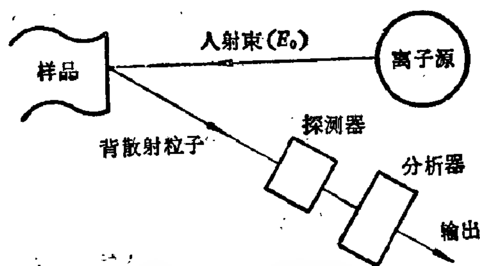


图 3.1-5　背散射测量示意图

号，由多道分析器进行分析处理，不同能量的背散射粒子记录在不同的道数中，形成背散射谱，如图 3.1-6 所示. 图中 i 表示道数，纵坐标 H_i 表示每道计数，即产额. 背散射粒子的能量和粒子计数的道址相对应，如图 3.1-7 所示. 这种对应关系必须在实验中确

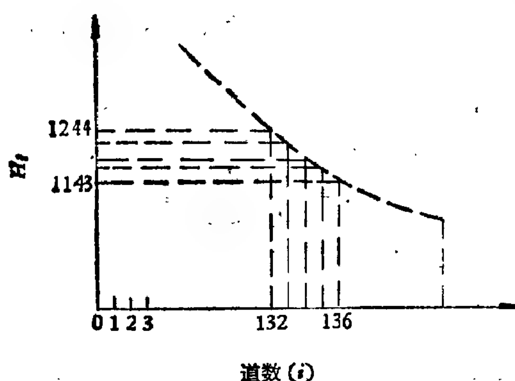


图 3.1-6　分析器道址对产额的背散射谱

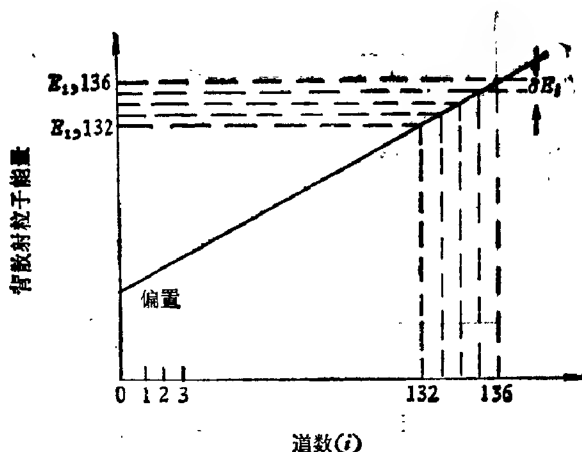


图 3.1-7 粒子能量和被记录的道数之间关系

定. 图中横坐标为道数 i，纵坐标表示接收粒子的能量 E_1，E_{1i} 为第 i 道中的粒子能量. 若粒子能量与道数之间是线性关系，直线的斜率为 δE_1（δE_1 为一道的能量区域），加上能量偏置，就可以把背散射粒子的整个能量区域用多道分析器的道数来刻度. 对于兆电子伏 $^4He^+$ 束，一般 δE_1 为 4 千电子伏，偏置值为几百千电子伏. 知道了粒子能量和道数关系后，就可以把测出的背散射谱(图 3.1-6)的横坐标转换成能量 E_1（如图 3.1-8 的形式）.

图 3.1-8 是一个连续变化的背散射谱，H 为谱的高度或产额. 由于背散射粒子的能量在一般情况下总是比入射离子能量 E_0 小，其值由前面所说的运动学因子 K 决定，即 KE_0，所以背散射粒子能谱的最大能量值在 KE_0 处，此处的谱高度 $H(KE_0)$ 是由表面原子散射引起的. 另外，入射粒子还会穿过表层原子并同样品内部的原子相互作用而发生散射，此时背散射粒子的能量比表面原子产生的背散射粒子小. 因为入射离子在物质中沿入射方向运动时会同靶内电子作用，损失一部分能量. 在散射后，背散射粒子沿出射轨道运行又要损失一部分能量. 如果和入射粒子碰撞的靶原子位置愈深，则背散射粒子的能量损失就愈大. 因此，入射离子能量减少的程度反映了同入射粒子碰撞产生背散射的靶原子在样品

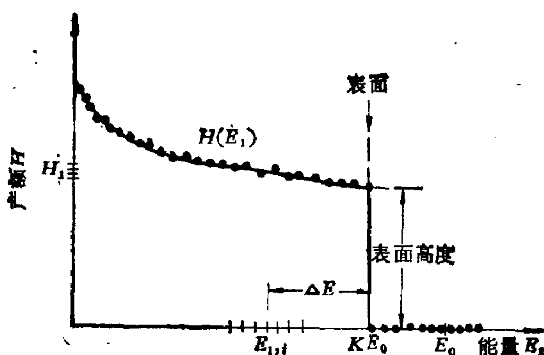


图 3.1-8 背散射能谱

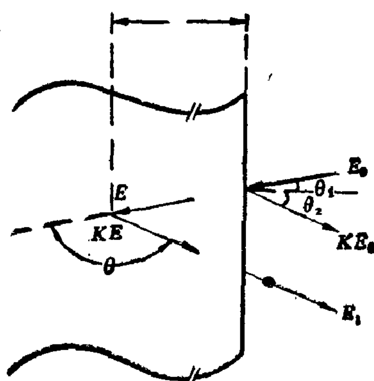


图 3.1-9 描述在单元素靶上背散射事件的一些记号. 入射束，探测方向和样品表面垂直线在同一平面上

中的深度.

在作深度探针的实际应用时，所用的入射粒子能量是在 100 千电子伏和兆电子伏范围. 图 3.1-9 中入射粒子能量 E_0，在深度 x 处，散射前夕的能量是 E 以及离开表面时粒子能量为 E_1. 若入射粒子、出射粒子和表面垂直线在同一平面内，则实验室坐标系中散射角是 $\theta = 180° - \theta_1 - \theta_2$，$\theta_1$ 和 θ_2 分别为入射粒子束和散射粒子束同表面垂直的夹角. 不管实验几何如何，θ_1 和 θ_2 总定义为正的. 根据第二章的讨论可得在物质中入射路长

$$\frac{x}{\cos\theta_1} = -\int_{E_0}^{E} \frac{dE}{\left(\frac{dE}{dx}\right)} \tag{3.1-12}$$

其中负号表示 E 小于 E_0，$\frac{dE}{dx}$ 取正值．出射路程长为

$$\frac{x}{\cos\theta_2} = \int_{KE}^{E_1} \frac{dE}{\left(\frac{dE}{dx}\right)} \tag{3.1-13}$$

图 3.1-10 给出上面两个方程的图形解释．图 3.1-10(a) 给出 $\frac{dE}{dx}$ 是能量的函数，两段粗黑线分别表示 E_0 到 E 的向内的 $\frac{dE}{dx}$ 值和从 KE 到 E_1 的向外路径的 $\frac{dE}{dx}$ 值，所以 $E_0 - E$ 是沿入射路径的能量损失 ΔE_{in}，$KE - E_1$ 是出射路径的能量损失 ΔE_{out}．图 3.1-10(b) 是 $\frac{dE}{dx}$ 倒数曲线．根据 3.1-12 和 3.1-13 式，影线面积就分别是向里内路径长度 $\frac{x}{\cos\theta_1}$ 和向外路径长度 $\frac{x}{\cos\theta_2}$．若 $\theta_1 = \theta_2$，则两者路径相等．由于 E 实验上不可测量，故只有找出深度 x 同 E_0 和 E_1 的关系．

假定 $\frac{dE}{dx}$ 沿向内和向外路径是一个常数，(3.1-12) 式和 (3.1-13) 式的积分可简化成

$$E = E_0 - \int_{\frac{x}{\cos\theta_1}}^{0} \frac{dE}{dx}\, dx \simeq E_0 - \frac{x}{\cos\theta_1} \left.\frac{dE}{dx}\right|_{in} \tag{3.1-14}$$

$$E_1 = KE - \int_{\frac{x}{\cos\theta_2}}^{0} \frac{dE}{dx}\, dx \simeq KE - \frac{x}{\cos\theta_2} \left.\frac{dE}{dx}\right|_{out} \tag{3.1-15}$$

$\left.\frac{dE}{dx}\right|_{in}$ 和 $\left.\frac{dE}{dx}\right|_{out}$ 分别系指向内和向外路径上能量损失值．由这两个方程消去 E，则有

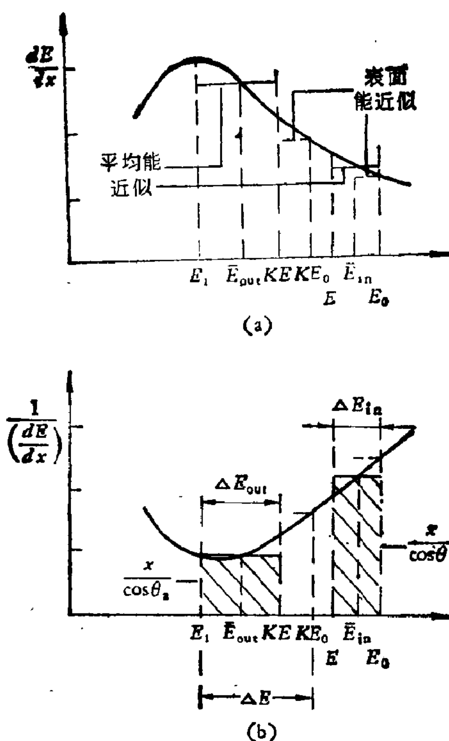


图 3.1-10 向内路径和向外路径(粗黑线)粒子能量损失的图象表示.

(a) $\frac{dE}{dx}$ 同 E 的关系； (b) $\left(\frac{dE}{dx}\right)^{-1}$ 同 E 的关系

$$KE_0 - E_1 = \left[\frac{K}{\cos\theta_1}\left.\frac{dE}{dx}\right|_{in} + \frac{1}{\cos\theta_2}\left.\frac{dE}{dx}\right|_{out}\right]x \tag{3.1-16}$$

KE_0 相当于自靶表面原子散射粒子的能量. 能量 E_1 为深度 x 处一个原子散射一个粒子所测得的能量值. 令 ΔE 为 E_1 和 KE_0 之差，即

$$\Delta E = KE_0 - E_1 = [S]x \tag{3.1-17}$$

则

$$[S] = \left[\frac{K}{\cos\theta_1}\left.\frac{dE}{dx}\right|_{in} + \frac{1}{\cos\theta_2}\left.\frac{dE}{dx}\right|_{out}\right] \tag{3.1-18}$$

称之为能量损失因子(散射因子)或 S 因子[*]. 若用阻止截面来表示 ΔE，即

$$\Delta E = [\varepsilon]Nx \tag{3.1-19}$$

和

$$[\varepsilon] = \left[\frac{K}{\cos\theta_1}\varepsilon_{in} + \frac{1}{\cos\theta_2}\varepsilon_{out}\right] \tag{3.1-20}$$

叫做阻止截面因子或 ε 因子. 假定 $\frac{dE}{dx}$ 或 ε 沿每个路径为一常数，就得到在 KE_0 边缘之后能量 ΔE 和发生散射的深度有线性关系. 从公式(3.1-17)可看到，对于一定深度 x，就可找到对应的 ΔE. 这样，被散射谱中的能量坐标就可以相应地转化为深度坐标(如图 3.1-8 所示). 一般说来，求得 $[S]$ 是相当复杂的，需用数值解(3.1.16)式，找 E 更为困难，这里给出几种近似方法[3].

(1) 表面能近似

在接近表面的区域，厚度 x 很小. 设入射路径的粒子能量相对变化也很小. 因此，$\left(\frac{dE}{dx}\right)\Big|_{out}$ 就取 KE_0 处的 $\frac{dE}{dx}\Big|_{KE_0}$，如图 3.1-10 所示. 故在表面能近似条件下，$[S]$ 和 $[\varepsilon]$ 变成:

$$[S_0] = \left[\frac{K}{\cos\theta_1}\frac{dE}{dx}\Big|_{E_0} + \frac{1}{\cos\theta_2}\frac{dE}{dx}\Big|_{KE_0}\right] \tag{3.1-21}$$

$$[\varepsilon_0] = \left[\frac{K}{\cos\theta_1}\varepsilon(E_0) + \frac{1}{\cos\theta_2}\varepsilon(K_{E_0})\right] \tag{3.1-22}$$

这种近似方法经常采用. 在垂直表面入射时,即 $\theta_1 = 0°$ 和 $\theta_2 = 180° - \theta$，(3.1-21)式变为

$$[S_0]_{\theta_1=0°} = K\frac{dE}{dx}\Big|_{E_0} + \frac{1}{|\cos\theta|}\frac{dE}{dx}\Big|_{KE_0} \tag{3.1-23}$$

为实验上经常遇到的情况. (3.1-21)和(3.1-23)的近似表达式

---

[*] 注意与第二章阻尼能力 S_n 和 S_e 的区别，$S_n = -\frac{1}{N}\frac{dE}{dx}\Big|_n$.

已绘于图 3.1-10.短的水平虚线分别表示能量 E_0 和 KE_0 处的 $\frac{dE}{dx}$ 值，而在 $\frac{dE}{dx}$ 曲线上的两条粗黑的曲线段分别表示散射前入射路径和散射后出射路径的 $\frac{dE}{dx}$ 的实际值.

这种近似方法在通常情况下是相当精确的. 如图 3.1-11 是用方程 (3.1-16) 的数值计算和方程 (3.1-21) 的表面近似两种方

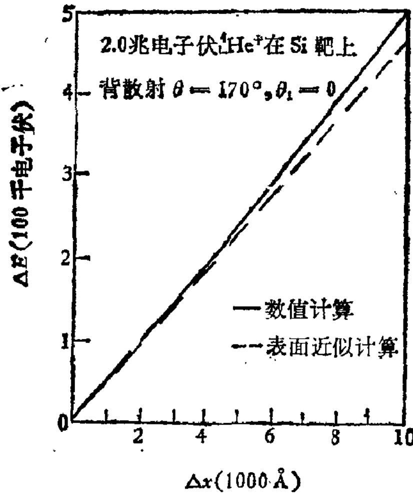


图 3.1-11 2 兆电子伏 $^4He^+$ 在硅上背散射，ΔE 和 Δx 的关系

法做出的. 可以看到使用表面近似时，在 8000 Å 厚的薄层中误差为 5%. 因此，用 2 兆电子伏 $^4He^+$ 离子测量硅的背散射时，薄层在 8000 Å 以内均可用表面能近似.

(2) 平均能量近似(较厚的靶)

由于实际能量变化 ΔE 与深度 x 的关系不是一条直线，而是如图 3.1-10(a)所示的曲线. 因此，当粒子在物质中路径较长时表面能近似就不适用了. 由图 3.1-10 可在入射路径和出射路径上选择平均能量之点来得到对应的 $\frac{dE}{dx}$，这样可以获得较好的近似，定义

$$[\bar{S}] \equiv \left[\frac{K}{\cos\theta_1} \frac{dE}{dx}\bigg|_{\bar{E}_{in}} + \frac{1}{\cos\theta_2} \frac{dE}{dx}\bigg|_{\bar{E}_{out}} \right] \tag{3.1-24}$$

$$[\varepsilon] \equiv \left[\frac{K}{\cos\theta_1} \varepsilon(\bar{E}_{in}) + \frac{1}{\cos\theta_2} \varepsilon(\bar{E}_{out}) \right] \tag{3.1-25}$$

在平均能近似下，假定

$$\bar{E}_{in} = \frac{1}{2}(E + E_0) \tag{3.1-26}$$

$$\bar{E}_{out} = \frac{1}{2}(E_1 + KE) \tag{3.1-27}$$

这两个式子中 E 是不知道的，但可用各种方式来估计．例如，能量损失比，迭代法，ε 的级数展开以及数值方法．

快速估计 $\bar{E}$ 的方法是假定已知能量差 $\Delta E = KE_0 - E_1$，于是 E 可近似为 $E_0 - \frac{1}{2}\Delta E$，则 $\bar{E}_{in}$ 和 $\bar{E}_{out}$ 由下式给出

$$\bar{E}_{in} \simeq E_0 - \frac{1}{4}\Delta E \tag{3.1-28}$$

$$\bar{E}_{out} \simeq E_1 + \frac{1}{4}\Delta E \tag{3.1-29}$$

用这些值可求出 $[\varepsilon]$ 或 $[\bar{S}]$，叫做对称的平均能量近似，也即线性近似．在 $K \simeq 1$ 和 $\theta_1 = \theta_2$ 时特别简单而有效．一般用 2 兆电子伏 ^{4}He 离子对 8000 Å 厚的靶作背散射分析，用这种线性近似法计算的能量损失比用方程 (3.1-6) 计算值小 2%．

(3) 能量损失比的方法求 E

我们从实用的角度给出两种求 E 的办法：首先是能量损失比法．这是简单而很有用的步骤求得 E 是 E_1 和 E_0 的函数．假定比率 α 是出射路径损失的能量 ΔE_{out} 和入射路径损失的能量 ΔE_{in} 之比并同深度无关

$$\alpha = \frac{\Delta E_{out}}{\Delta E_{in}} = \text{常数} \tag{3.1-30}$$

如图 3.1-10 所示，有

$$\Delta E_{in} = KE - E_1$$

$$\Delta E_{out} = E_0 - E$$

于是

$$\alpha = \frac{KE - E_1}{E_0 - E}$$

及

$$E = \frac{E_1 - \alpha E_0}{K + \alpha} \tag{3.1-31}$$

α 的近似值可以从表面能量近似得到，即将 (3.1-12) 和 (3.1-13) 式写成

$$\frac{E_0 - E}{\varepsilon(E_0)N} = x\cos\theta_1$$

和

$$\frac{KE_0 - E_1}{\varepsilon(KE_0)N} = \frac{x}{\cos\theta_2}$$

所以

$$\alpha \simeq \frac{\varepsilon(KE_0)}{\varepsilon(E_0)} \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2} \tag{3.1-32}$$

α 值从查阻止截面的表很容易计算得到，然后把它代入 (3.1-31) 式求出 E. 这个方法对薄片谱的分析最精确，因为此时表面近似是成立的. 对较厚的靶片也适用，因为能量损失比 α 比 ε 变化慢.

(4) 数值法找 E

实际工作中，数值计算法是把深度分成许多相等宽度的窄条，如图 3.1-12. 计算从表面开始，所取的厚度 Δx 应相当薄，使得 $\frac{dE}{dx}$ 在宽度 Δx 范围内是一个常数. 第 $(n+1)$ 的窄条两边边界能量有如下的循环关系:

$$^{(n+1)}E = {}^{n}E - \left.\frac{dE}{dx}\right|_{^{n}E} \left(\frac{x}{\cos\theta_1}\right) \tag{3.1-33}$$

这样，人们可以得到入射粒子在每个窄条边界散射前夕的能量，粒

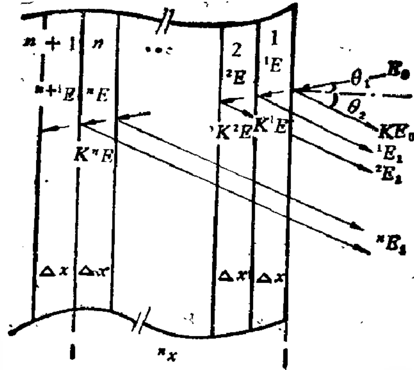


图 3.1-12 用数值方法计算在深度 x 处散射前夕能量 E 的示意图

子一经散射，能量很快为运动学因子 K 所减少. 沿着出射的路径上，每个窄条内所损失的能量等于那里的 $\frac{dE}{dx}$ 与有效路程长度 $\frac{x}{\cos\theta_2}$ 的乘积. 出射粒子的能量为 $^1E_1$，$^2E_1$，$^3E_1$，$\cdots$，$^nE_1$ 和 $^{n+1}E_1$ 等等. 其中 $^nE_1$ 是在第 n 个窄条内碰撞粒子的能量. 因此，

$$^1E_1 = K^1E - \frac{\Delta x}{\cos\theta_2}\frac{dE}{dx}\bigg|_{K^1E} \tag{3.1-34}$$

而先向内后向外两次通过窄条的散射后出射粒子的能量 $^2E_1$ 是

$$^2E_1 = \left(K^2E - \frac{\Delta x}{\cos\theta_2}\frac{dE}{dx}\bigg|_{K^2E}\right) - \frac{\Delta x}{\cos\theta_2}\frac{dE}{dx}\bigg|_{^1E} \tag{3.1-35}$$

此时假定 ^1E 为窄条 1 和窄条 2 交界面的能量，迭代这个步骤即得

$$^nE_1 = \left(\left(\left(\left(K^nE - \frac{\Delta x}{\cos\theta_2}\frac{dE}{dx}\bigg|_{K^nE}\right) - \frac{\Delta x}{\cos\theta_2}\frac{dE}{dx}\bigg|_{^{n-1}E}\right) - \frac{\Delta x}{\cos\theta_2}\frac{dE}{dx}\bigg|_{^{n-2}E}\right) - \frac{\Delta x}{\cos\theta_2}\frac{dE}{dx}\bigg|_{^{n-3}E}\right) - \cdots, \tag{3.1-36}$$

另外，还可以把样品分成不同厚度的窄条，窄条厚度的选择满

足从所有窄条两边界散射的粒子在探测器接收时具有固定的能量差. 其优点是把能量 E_1 分成相等的小增量正好配合多道分析器. 还有用多项式拟合的分析解来找 E 等方法，不过现在已有表可查.（可参考文献[3]表 VII).

(5) 深度分辨率

(3.1-21)式给出的散射因子，无论对于厚度 x 小时还是在 $\frac{dE}{dx}$ 随能量变化不快的区域，都是一个很好的近似. 当垂直入射且散射角接近 180° 时

$$[S] = K\left.\frac{dE}{dx}\right|_{E_0} + \left.\frac{dE}{dx}\right|_{KE_0} \tag{3.1-37}$$

因此，背散射中深度分辨率 δx 依赖于探测器的能量分辨率 δE

$$\delta E = [S]\delta x \tag{3.1-38}$$

所以

$$\Delta x = \frac{\Delta E}{\dfrac{K\left.\frac{dE}{dx}\right|_{in}}{\cos\theta_1} + \dfrac{\left.\frac{dE}{dx}\right|_{out}}{\cos\theta_2}} \tag{3.1-39}$$

三 背散射产额——能谱高度

现在建立能谱高度和样品中单位面积散射中心数目之间的关系. 为了方便，以后讨论的内容均是垂直入射的情形，即 $\theta_1 = 0$.

(1) 表面产额

首先讨论发生在样品表面层的背散射事件所得到的背散射谱. 由于在这个区域散射前夕的能量可取作 E_0，分析起来大为简化. 图 3.1-13 是这个表面层背散射过程示意图和谱. 表面处的谱高度，即一道的计数，可以写成

$$H = Q\sigma(E_0)\Omega N\delta x/\cos\theta_1 \tag{3.1-40}$$

这方程说明在表面的能谱高度正比于

(i) Q，打到样品上入射粒子总数；

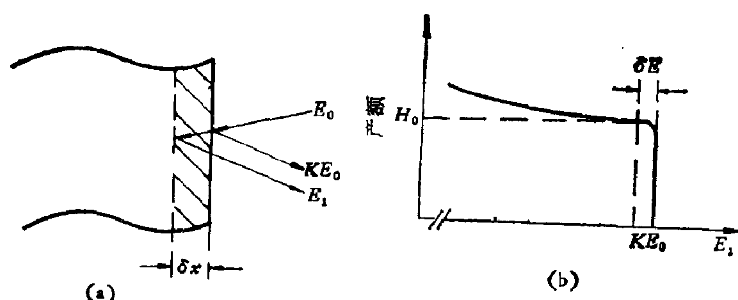


图 3.1-13 各向同性单元素样品表面区域背散射过程示意图 (a) 和能谱图 (b)

(ii) $\sigma(E_0)$，在入射能量为 E_0 时入射粒子和靶之间的平均微分散射截面；

(iii) Ω，探测器对应的立体角；

(iv) N，原子密度；

(v) δx，靶中散射到能量间隔 δE_1 的厚度，增量 δE_1 是谱中每道能量宽度.

在垂直入射，即 $\theta_1 = 0$ 时，利用 $\delta E_1 = [S_0]\delta x$，(3.1-40) 式变成

$$H = Q\sigma(E_0)\Omega N \frac{\delta E_1}{[S_0]} \text{(表面产额)} \qquad (3.1\text{-}41a)$$

或

$$H = Q\sigma(E_0)\Omega \frac{\delta E_1}{[\varepsilon_0]} \qquad \text{(表面产额)} \qquad (3.1\text{-}41b)$$

当 $\theta_1 \neq 0$ 时，谱高度与表面处阻止截面因子及束流入射角 θ_1 的余弦乘积的倒数成正比，这可以理解为粒子在向内和内外通过表面层时损失的能量. 如果阻止截面高，阻止截面因子$[\varepsilon_0]$也高，那么运动粒子通过较少的几个原子层就会消耗掉一定的能量. 这就是说，$[\varepsilon_0]$愈大，在固定能量间隔 δE_1 内散射过程的数目就愈少.

例如，有两种靶材料 A 和 B，A 的阻止截面因子大于 B，如果能量损失相同，那么，入射粒子同 A 原子碰撞机会比 B 少．因此，对 A 靶一给定道的背散射事件就比较少．

(2) 在一定深度的散射产额

深度剖析的基础就是把谱的高度同深度 x 处宽度为 δx 的窄条材料及其单位面积上的原子数目联系起来．图 3.1-14 给出深度 x 处的背散射过程示意图（a）和背散射能谱图（b）．其中

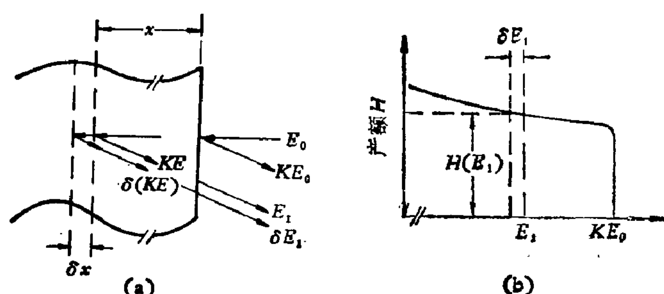


图 3.1-14 各向同性单元素样品中，深度 x 处的背散射过程示意图（a）及能谱图（b）

δE_1 定义为探测系统的道宽，而 $\delta(KE)$ 是在那个散射深度靶内相对应的能量宽度．类似（3.1-41）式，在入射能量为 E_0 时谱的高度为

$$H(E_1) = Q\sigma(E)\Omega N \frac{\delta(KE)}{[S(E)]}$$

$$= Q\sigma(E)\Omega \frac{\delta(KE)}{[\varepsilon(E)]} \qquad (3.1-42)$$

其中 $\delta(KE)$ 也可近似表示成

$$\delta(KE) \simeq \frac{\varepsilon(KE)}{\varepsilon(E_1)} \delta E_1 \qquad (3.1-43)$$

方程（3.1-42）与方程（3.1-41）不同之点有：(i) $\delta(x)$ 是在靶内而不是在表面，所以产生的能量宽度是 $\delta(KE)$，而它在靶外

又变成 δE_1. (ii) 能量 E 确定的局部深度标度 $[\delta(E)]$ 把 $\delta(x)$ 和 $\delta(KE)$ 联系起来. 从 3.1-14 图可得

$$\delta(KE) = [S(E)]\delta x \tag{3.1-44}$$

$$[S(E)] = K \left.\frac{dE}{dx}\right|_E + \frac{1}{|\cos\theta|}\left.\frac{dE}{dx}\right|_{KE} \tag{3.1-45}$$

也就是说,求能量为 E 的粒子在靶内散射而从靶跑出时能量为 E_1 的产额, 需要 $[S(E)]$. (iii) 截面 σ 是连续变量 E 的函数而不是常数, 因此, 谱的高度 H 也是探测粒子能量 E_1 的连续函数. $\delta(KE)$ 项是不可测量的, 但它可同 E_1 联系起来. 于是方程 (3.1-42) 变为

$$\begin{aligned} H(E_1) &= Q\sigma(E)\Omega N \frac{\delta E_1}{[S(E)]}\left(\left.\frac{dE}{dx}\right|_{KE} \Big/ \left.\frac{dE}{dx}\right|_{E_1}\right) \\ &= Q\sigma(E)\Omega \frac{\delta E_1}{[\varepsilon(E)]}\frac{\varepsilon(KE)}{\varepsilon(E_1)} \end{aligned} \tag{3.1-46}$$

这个结果的物理意义是: 随着入射束穿进样品, 入射粒子能量逐渐减小,散射截面 $\sigma(E)$ 增加,这就使得产额 $H(E_1)$ 随着探测粒子能量 E_1 的减小而增加. 另一方面,阻止截面 $\varepsilon(E)$ 也随 E 改变. 一般来说, $\varepsilon(E)$ 同 E 的依赖关系不象 $\sigma(E)$ 那样强, 但是当 E 的值减小时, ε 可能增大,也可能减小. 因此, ε 的变化对背散射产额来说可能增强,也可能减弱. 具体地说,当 ε 随能量减少而增加时,产额减小,因为它同 $[\varepsilon(E)]$ 成反比. 而比率 $\varepsilon(KE)/\varepsilon(E_1)$ 变化对产额的贡献是不重要的.

§ 3.2 各种靶的背散射谱

一 单元素靶

(1) 薄片分析

背散射谱学的一个重要应用是分析薄片和层状结构的固体材料. 这种谱的突出特征是在背散射信号中既可确定前界面又可确

定后界面．因此，有两个独立的参数：（i）相应于两个交界面信号的两边缘之间的能量宽度 ΔE，（ii）两边缘之间信号各自所包含的总计数 A． 这两个量均直接与薄片中每单位面积的原子数目有关．图 3.2-1 给出薄片靶背散射示意图． 薄片背散射信号的能量宽度按（3.1-17）式给出

$$\begin{aligned}\Delta E &= [S_0]t \\ \Delta E &= N[\varepsilon_0]t\end{aligned} \tag{3.2-1}$$

t 为薄片厚度． 由（3.1-41）式给出表面散射粒子产生谱的高度．

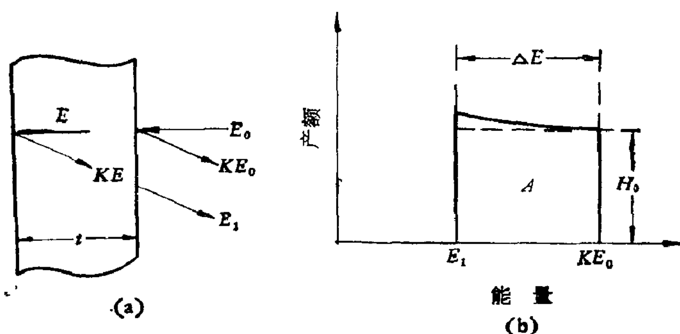


图 3.2-1 各向同性单元素薄片样品背散射过程示意图（a）及背散射能谱图（b）

如果靶很薄，谱的高度变化不大，那么谱的面积（即总计数）可用矩形面积表示

$$A = H\left(\frac{\Delta E}{\delta E_1}\right) = Q\sigma(E_0)\Omega\,\frac{\Delta E}{[\varepsilon_0]} \tag{3.2-2a}$$

由（3.2-1）式得

$$A = Q\sigma(E_0)\Omega N t \tag{3.2-2b}$$

一般情况下，散射截面与能量平方成反比，即有

$$\sigma(E) = \sigma(E_0)\left(\frac{E_0}{E}\right)^2 \tag{3.2-3}$$

因此，当薄片有一定厚度时，散射前夕能量 E 的减少相当可观，散射截面随深度增加，这就使得谱高度随能量减少而增加，如图 3.2-1(b) 的曲线所示．所以，在计算总计数 A 时，必须考虑散射截面

的能量关系．对于厚度为 t 的薄片，我们有

$$A = \Omega QN\int_0^t \sigma(E)dx \tag{3.2-4}$$

及

$$E = E_0 - N\varepsilon(\bar{E}_{in})x \tag{3.2-5}$$

其中 $N\varepsilon(\bar{E}_{in})x$ 是粒子沿入射路径所损失的能量．将 (3.2-5) 和 (3.2-3) 式代入方程 (3.2-4) 式，并假定 $\varepsilon(\bar{E}_{in})$ 是一个常数，将 $\sigma(E)$ 从 $x = 0$ 到 $x = t$ 积分可得

$$A = \Omega Q\sigma(E_0)Nt \frac{1}{1 - Nt\varepsilon(\bar{E}_{in})/E_0} \tag{3.2-6}$$

或

$$Nt = \frac{A/\sigma(E_0)\Omega Q}{1 + [\varepsilon(\bar{E}_{in})A/\sigma(E_0)\Omega QE_0]} \tag{3.2-7}$$

其中 $\bar{E}_{in}$ 可用对称的平均值 $E_0 - \frac{\Delta E}{4}$，甚至就用 E_0 相当精确地表示出来．(3.2-7) 式关于 Nt 的显著特征是阻止截面仅出现在修正项中．因此，根据总计数 A 确定的单位面积原子数基本上与薄片中元素的阻止截面无关，但必须知道打到靶上粒子总数 Q 和探测器立体角 Ω．因此，要对系统进行绝对标定．方程 (3.2-6) 右边的第一部分就等于 (3.2-2b) 式表示的矩形面积，写成

$$(Nt)_0 = A/\sigma(E_0)\Omega Q \tag{3.2-8}$$

于是，(3.2-7) 式可表示成

$$Nt = (Nt)_0\{1 + (Nt)_0[\varepsilon(\bar{E}_{in})/E_0]\}^{-1}$$

如果知道 $[\varepsilon]$，并从实验上测得样品前表面散射能量 KE_0 和后表面散射能量 E_1 之差 $\Delta E = KE_0 - E_1$，则由

$$\Delta E = [\varepsilon]Nt$$

可以确定薄片中每单位面积的原子数目 Nt．不过这样得到的结果没有 (3.2-7) 式的精确．

用背散射谱分析一种较重元素沉积在较轻的衬底上形成薄膜的厚度是很方便的，因为这时衬底的背散射信号不会同薄膜的信号相干扰．在厚度 $t > 100$ Å时，可从背散射谱中确定每平方厘米

的原子数 Nt.图 3.2-2 是用 2.0 兆电子伏 $^4He^+$ 对铂蒸发到硅片上得到 x 种不同厚度的薄膜的背散射谱[4]. 从背散射谱中确定厚度范围是在 125 到 4000 Å. 为简便起见,图中没有画出硅衬底的背

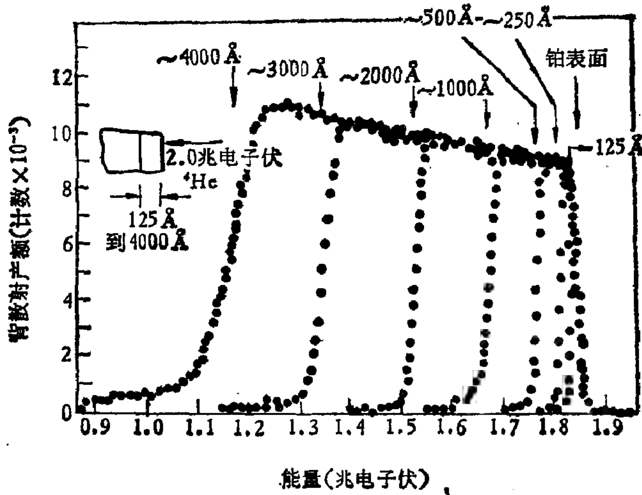


图 3.2-2 2兆电子伏 ^4He 对铂蒸发到硅片上得 x 种不同厚度薄膜的背散射谱. 硅的背散射信号未画入[4]

散射谱. 从铂表面散射和铂-硅界面散射粒子之间的能量差在表面能近似下由 (3.1-19) 式给出

$$\Delta E = [\varepsilon]Nt \simeq [\varepsilon_0]Nt$$

$$= (224.4 \times 10^{-15})Nt \text{ 电子伏} \cdot \text{厘米}^2 \qquad (3.2\text{-}9)$$

$[\varepsilon_0]$ 是从文献 [3] 查表 VIII 得到. 所以,在表面能近似下, ΔE 和 t 之间有线性转换关系. 若用平均能近似,在 (3.2-8) 式中应用 (3.1-25) 式给出 $[\bar{\varepsilon}]$,

$$[\bar{\varepsilon}] = K_{Pt}\varepsilon(\bar{E}_{in}) + \frac{1}{\cos\theta}\varepsilon(\bar{E}_{out}) \qquad (3.2\text{-}10)$$

这里 $\bar{E}_{in}$ 和 $\bar{E}_{out}$ 依赖于铂层厚度. 所以, $[\bar{\varepsilon}]$ 随 t 变化. 不过 $[\bar{\varepsilon}]$ 仅用于估计膜厚. 如果铂膜原子密度也是 $N = 6.62 \times 10^{22}$ 原子/厘米^3, 那么就可得到厚度 t. 表 3.2-1 比较了上述两种不同近似下由能量宽度 ΔE 所确定厚度 t 的值,其中 E_1 是由图

3.2-2 中每个谱后沿的位置得到的.后沿的斜坡是由于 ^{4}He 离子能量离散,系统的分辨率和薄膜的非均匀性造成的,后沿位置可取其半高度处的位置.从表中看出,厚度为 1000 Å时,两者相差约 1%.

表 3.2-1 表面能近似和平均能近似下背散射谱决定薄膜厚度的比较(图 3.2-2)

	E_1(千电子伏) ΔE_1(千电子伏)	1170 674	1350 494	1526 318	1670 174	1765 79
表面能近似	t(Å)	4540	3330	2140	1170	530
平均能近似	t(Å)	4320	3200	2100	1150	530
差值	(%)	5.0	3.9	1.9	1.7	0

确定厚度的另一种方法是从背散射信号的面积计算厚度,如(3.2-2b)式.如果考虑入射束进入靶有能量损失,散射截面随入射粒子能量损失而增加.那么,这时散射截面的能量关系应有一个修正,如(3.2-6)式.对 1000 Å 的铂膜,当 2.0 兆电子伏 ^{4}He 垂直入射时,此修正项约 3.8%.

$$(Nt)_0 = A/\sigma(E_0)\Omega Q = 6.62 \times 10^{17} \text{ 原子/厘米}^2 \tag{3.2-11a}$$

和

$$Nt = (Nt)_0\{1 - [\varepsilon(E_0)(Nt)_0/E_0]\} = (Nt)_0[1 - 0.038] \tag{3.2-11b}$$

铂的 $\varepsilon(E_0)$ 为 115×10^{-15} 电子伏·厘米^2. 如果入射能量固定,修正的大小正比于 Nt 和 ε. 原子数低则 ε 小,修正量也小. 例如,1000 Å 厚的硅膜,2.0 兆电子伏 ^{4}He 背散射的修正量只有 1.2% 而不是 3.8%.

2.0 兆电子伏 ^{4}He 所探知的深度取决于 $^4He^+$ 在靶中的能量损失.例如,$\Delta E = 500$ 千电子伏在铂中给出 $\Delta t = \frac{1}{3}$ 微米,而硅和铝中则有 1 微米. 2 兆电子伏的氦离子能分析铂膜的最大厚度是 1 微米.由于质子在同样材料中的能量损失要小得多,因此,用质子背散射测量薄膜厚度要厚得多. 如图 3.2-3 示出 1.4 兆千

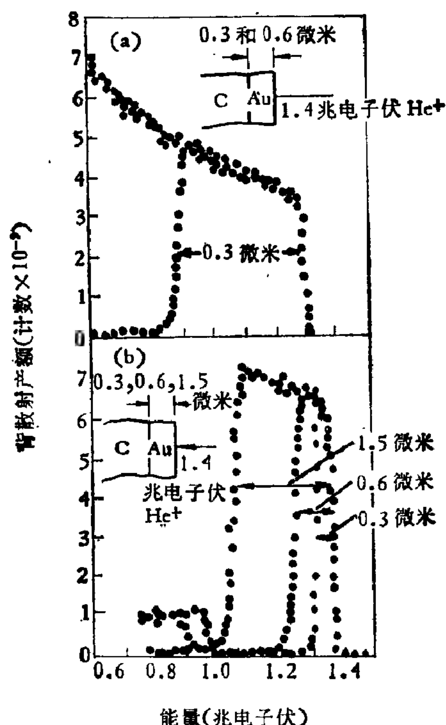


图 3.2-3 1.4 兆电子伏 $^4He^+$(a) 和 $^1H^+$(b) 对沉积在碳衬底上金膜的背散射谱[5]

表 3.2-2 $^1H^+$ 和 $^4He^+$ 对 Al, Ni, Ag 和 Au 等进行背散射分析的深度

入射粒子	入射能量 E_0（兆电子伏）	可分析的深度			
		Al	Ni	Ag	Au
^1H	0.5	1.8	1	1	1
	1.0	4.5	2.4	2.7	2.4
	2.0	15	6.9	7.7	6.4
^4He	0.5	0.6	0.3	0.3	0.3
	1.0	1	0.5	0.6	0.5
	2.0	1.7	1	1.1	1

子伏 $^4He^+$ (a) 和质子 (b) 对沉积在碳衬底的金膜上的背散射

谱. 对 0.6 微米厚的金膜, 1.4 兆电子伏 $^4He^+$ 已不能探知 [图 3.2-3(a)], 而图 3.2-3(b) 表明 1.4 兆电子伏质子测量 3 微米厚的金膜是没有问题的. 一般来说,兆电子伏能量的 ^4He 离子背散射分析的厚度约是 1 微米,而质子束则用于分析 1 到 10 微米厚的材料. 表 3.2-2 列出不同能量的氢和氦离子对一些元素靶背散射谱可分析的深度.

(2) 表面杂质

假定在质量 M 较轻的本底上有较重元素 i 的杂质. 在图 3.2-4 中, A_i 是杂质背散射信号的面积,而 H_M 是自本底表面散射信号的高度. 由方程 (3.2-2 b) 得杂质数量(每单位面积的原子数) $(Nt)_i$ 是

$$(Nt)_i = \frac{A_i}{\Omega Q \sigma_i} \tag{3.2-12}$$

脚标 i 代表杂质元素. σ_i 可查表[1]后乘以修正因子或用第二章截面公式计算出来, 立体角 Ω 由实验装置确定, 而电荷量 Q 是测量

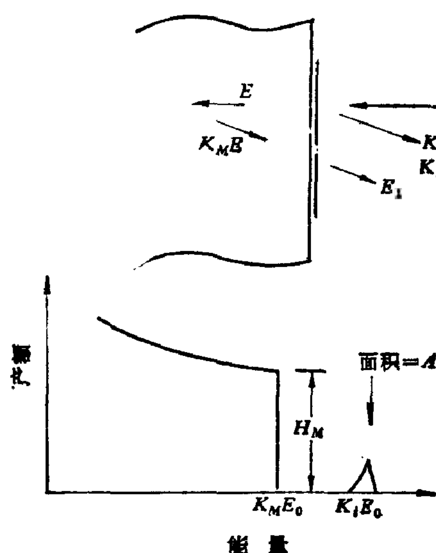


图 3.2-4 表面含有较重杂质元素的背散射分析

过程从电流剂量仪得到的．从（3.1-41b）式可知本体表面产生的信号高度能提供入射粒子总数和探测器立体角乘积的信息，

$$Q\Omega=\frac{H_M[\varepsilon]_M^M}{\sigma_M\delta E_1} \qquad (3.2\text{-}13)$$

其中背散射阻止截面因子的下标和上标分别表示散射原子和阻止介质；若简写成 $[\varepsilon]_M$ 就意味着M既代表散射原子又代表阻止介质．将（3.2-13）式代入（3.2-12）式即得每平方厘米含杂质原子数

$$(N_t)_i=\frac{A_i}{H_M}\frac{\sigma_M}{\sigma_i}\frac{\delta E_1}{[\varepsilon]_M^M} \qquad (3.2\text{-}14)$$

脚标M代表本体元素的各个量．把样品相对于入射束倾斜则可证明杂质元素是在表面，因为这时杂质的背散射信号的能量不随倾角移动．

图 3.2-5 是 2.0 兆电子伏 ^{4}He 离子对碳靶在散射角为 170° 的背散射谱．其中表面杂质含有氧、硅和金．碳本体谱的前沿是 98 道(位置取半高度处)，三个杂质的峰位置是在 141、222 和 366 道(位置均取在各峰最大值半宽度之中点)．右边坐标为运动学因子，其值为 $K_C=0.2526$，$K_O=0.3625$，$K_{Si}=0.5657$ 和 $K_{Au}=$

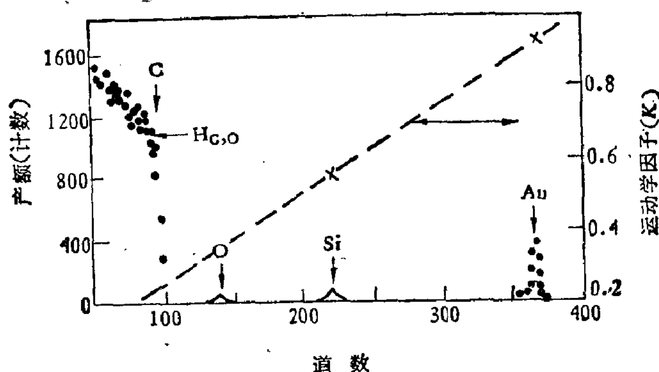


图 3.2-5 2.0 兆电子伏 ^{4}He 对含有 O、Si 和 Au 的碳靶的背散射谱．实验条件：垂直入射，$\theta=170°$，$\Omega=4.11$ msr，束流为 15 微安，$Q=10$ 微库$=6.25\times10^{13}$ 离子

0.9225[3]．虚线的斜率给出道宽为 5 千电子伏，在 18 千电子伏处截止．因此，探测能量 E_1 可从 5 千电子伏乘以道数再加上 18 千电子伏得到．在这个实验中，固体探测器所用的活性面积为 49 毫米^2，离靶 109.2 毫米远，立体角是 4.11 毫球面角度 (msr)．收集的总电荷是 10 微库仑，$Q = 6.25 \times 10^{13}$ 离子．根据 (3.2-12) 和 (3.2-14) 式算出表面上每单位面积的原子总数 $(Nt)_j$ 放在表 3.2-3 中．在收集电荷时要注意去掉二次电子．

表 3.2-3　图 3.2-5 的结果分析*)

元素	质量（原子单位）	K_j	K_jE_0（千电子伏）	σ_j（$\times 10^{-24}$ 厘米^2）	A_j（计数）	$(Nt)_j$ (10^{15} 原子/厘米^2)	
						方程 (3.2—12)	方程 (3.2—14)
C	12	0.2526	505	0.037	1100**)		
O	16	0.3625	725	0.074	390	20.5	20.9
Si	28	0.5657	1131	0.248	460	7.2	7.4
Au	197	0.9225	1845	8.200	1400	0.67	0.68

*) 实验条件：$E_0 = 2.0$ 兆电子伏，垂直入射，散射角 $\theta = 170°$，$\Omega = 4.11$ 毫球面度，$Q = 10$ 微库仑 $= 6.25\times10^{13}$ 离子，$\delta E_1 = 5.0$ 千电子伏及 $[\varepsilon_0]_M = 42.6 \times 10^{-15}$ 电子伏・厘米^2，K_j 和 σ_j 取自文献[1]．

**) H_M 为碳背散射信号的表面高度．

表 3.2-3 和图 3.2-5 通常用来估计背散射法确定杂质的灵敏度（一个原子层的量级通常是 10^{15} 原子/厘米^2）．原则上讲，一个低噪声系统中应该没有本底计数，只要不断增大 Q 就可以探测很少量的杂质．然而，实际上，Q 愈大本底噪声也愈大，所谓灵敏度总是同具体实验条件有关．象上述的这种情况，2.0 兆电子伏 ^{4}He 离子背散射灵敏度也可从纯经验的公式

$$(Nt)_j \approx \left[\frac{Z_2\ (\text{本体材料})}{Z_1\ (\text{杂质元素})}\right]^2 \times 10^{14} \text{杂质原子/厘米}^2 \tag{3.2-15}$$

来估算．它只给出表面杂质的最少数量的估计值，而且仅适用 Z_1（杂质元素）大于 Z_2（本体材料）的情况．对于碳表面含金杂质，上式给出可探测的最小值为 10^{12} 原子/厘米^2．

(3) 一个厚衬底上有两层薄膜的相对产额

图 3.2-6 是 SiO_2 衬底上有银和金两层薄膜及其背散射谱示意图. 金和银信号的高度分别为 H_{Au} 和 H_{Ag}, 其比率为

$$\frac{H_{Au}}{H_{Ag}}=\frac{\sigma_{Au}}{\sigma_{Ag}}\frac{[\varepsilon]_{Ag}^{Ag}}{[\varepsilon]_{Au}^{Au}}\left[\frac{\delta(K_{Au}E)}{\delta(K_{Ag}E)}\right] \tag{3.2-16}$$

最后一项 $\delta(K_{Au}E)/\delta(K_{Ag}E)$ 很接近于 1. 大多数情况取 1 时只有 5% 的误差. 但是, 为了考虑谱中每道能量和靶中界面处一层 δx 相应能量宽度之差, 这一项不可取为 1 [见 (3.1-44) 和 (3.1-46) 式]. 银和金的修正项略有不同,有两种方法可求得这一项. 第一,阻止截面比,也即

$$\frac{\delta(K_{Au}E)}{\delta(K_{Ag}E)}\simeq\frac{\varepsilon^{Au}(K_{Au}E)}{\varepsilon^{Au}(E_{1,Au})}\frac{\varepsilon^{Au}(E_{1,Ag})}{\varepsilon^{Au}(K_{Ag}E)} \tag{3.2-17}$$

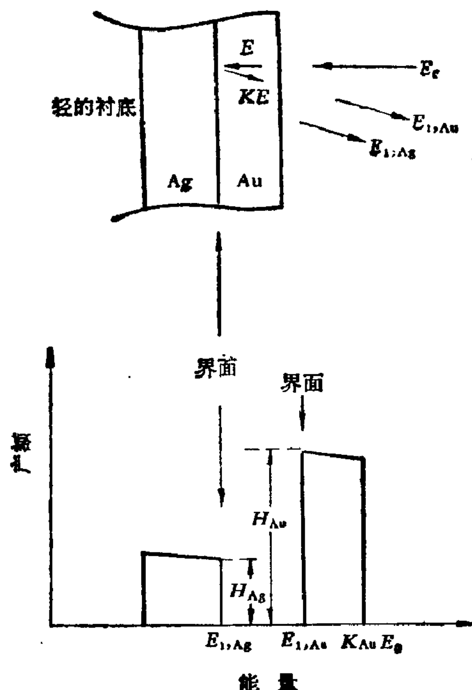


图 3.2-6 在轻元素衬底上两种重元素薄膜(金在银上)背散射谱的相对高度

式中用 ε^{Au} 是因为在 Au 中出射路径的能量损失. 这里 $E_{1,Au}$ 和 $E_{1,Ag}$ 是探测器中测量到的在界面处分别自金和银散射的粒子的能量.

第二种方法是用阻止截面的变化来表示 $\delta(KE)$,

$$\delta(K_{Au}E) \simeq \left[1 + \frac{d\varepsilon^{Au}}{dE}(\bar{E}_{Au})N^{Au}t^{Au}\right]\delta E$$
$$\delta(K_{Ag}E) \simeq \left[1 + \frac{d\varepsilon^{Au}}{dE}(\bar{E}_{Ag})N^{Au}t^{Au}\right]\delta E \tag{3.2-18}$$

作为一种近似,用 $K_{Au}E$ 和 $K_{Ag}E$ 求 $\frac{d\varepsilon}{dE}$. 对 2000 埃厚金膜的修正项 $\frac{d\varepsilon}{dE}Nt$ 的大小在 0.7 兆电子伏入射时为+3%,在 2.0 兆电子伏时为 −2%. 从方程 (3.2-18) 可得

$$\frac{\delta(K_{Au}E)}{\delta(K_{Ag}E)} \simeq 1 + \left[\frac{d\varepsilon^{Au}}{dE}(K_{Au}E) - \frac{d\varepsilon^{Au}}{dE}(K_{Ag}E)\right]N^{Au}t^{Au} \tag{3.2-19}$$

方程 (3.2-19) 比方程 (3.2-17) 复杂得多,但它给出了修正项的大小, 而且修正项正比于厚度 Nt. 在大多数情况下两者相差不到 0.2%. 如果只考虑相当于表面或接近表面散射那部分谱的高度比,则 (3.2-16) 式简化为

$$\frac{H_{Au}}{H_{Ag}} = \frac{\sigma_{Au}}{\sigma_{Ag}}\frac{[\varepsilon]_{Ag}^{Ag}}{[\varepsilon]_{Au}^{Au}} \tag{3.2-20}$$

利用相对高度测量比绝对高度测量的优点是: (i) 不需要对 Q 和 Ω 进行绝对标定; (ii) 对仪器装置的长期稳定性要求不那么严格.

二 化合物靶 ($\theta_1 = 0$, 垂直入射)

(1) 薄膜

若有一均匀自持的 Al_2O_3 薄膜并假定整个薄片厚度内能量损失近似一个常数. 那么

$$t = \frac{\Delta E_{Al}}{[S]_{Al}^{Al_2O_3}} \tag{3.2-21a}$$

或者

$$t=\frac{\Delta E_{\mathrm{O}}}{[S]_{\mathrm{O}}^{\mathrm{Al_2O_3}}} \qquad (3.2\text{-}21\mathrm{b})$$

其中上标（Al_2O_3）系整个氧化铝的介质，也即入射粒子在其中损失的能量；而下标 Al 或O表示入射粒子同铝或氧原子发生散射.

$$[S]_{\mathrm{Al}}^{\mathrm{Al_2O_3}}=K_{\mathrm{Al}}\left.\frac{dE}{dx}\right|_{(E_0)}+\frac{1}{|\cos\theta|}\left.\frac{dE}{dx}\right|_{(K_{\mathrm{Al}}E_0)} \qquad (3.2\text{-}22)$$

式中能量损失的一项 $\left(\frac{dE}{dx}\right)$ 总是对介质（Al_2O_3）决定的. 对于 $[S]_{\mathrm{O}}^{\mathrm{Al_2O_3}}$ 只要把 K_{Al} 换成 K_{O} 即可. 在 E_0 处和在相应于表面原子散射的 KE_0 处求能量损失 $\left(\frac{dE}{dx}\right)$，如图 3.2-7 所示.

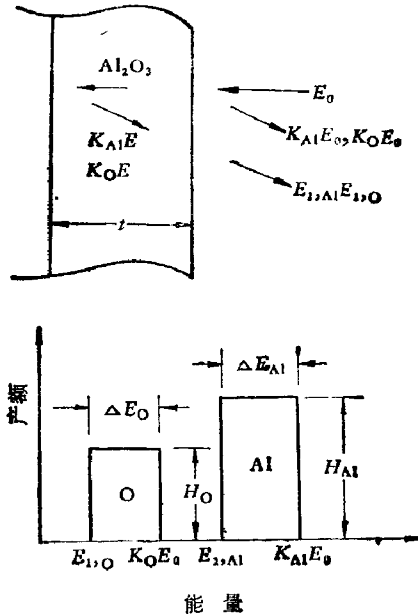


图 3.2-7 化合物薄膜分析：Al_2O_3 薄膜的厚度和组分

根据布喇格规则（见第二章 §2.4）可以假定阻止截面是单元素阻止截面之和：

$$[\varepsilon]^{\mathrm{Al_2O_3}}=2[\varepsilon]^{\mathrm{Al}}+3[\varepsilon]^{\mathrm{O}} \qquad (3.2\text{-}23)$$

但是由于元素和化合物密度不同，很难用 $\left(\frac{dE}{dx}\right)^{O}$ 和 $\left(\frac{dE}{dx}\right)^{Al}$ 的相加求得能量损失 $\left(\frac{dE}{dx}\right)^{Al_2O_3}$. 在利用分子阻止截面因子[ε]时，$Al_2O_3$ 薄膜厚度可表示成

$$N^{Al_2O_3}t = \frac{\Delta E_{Al}}{[\varepsilon]_{Al}^{Al_2O_3}} \tag{3.2-24a}$$

$$N^{Al_2O_3}t = \frac{\Delta E_{O}}{[\varepsilon]_{O}^{Al_2O_3}} \tag{3.2-24b}$$

式中 $[\varepsilon]_{Al}^{Al_2O_3}$ 和 $[\varepsilon]_{O}^{Al_2O_3}$ 由(3.2-22)式给出. 然而由于每个原子的阻止截面可定义为

$$\varepsilon = \frac{1}{N}\frac{dE}{dx} \tag{3.2-25}$$

故可把(3.2-22)式中的 $\left(\frac{dE}{dx}\right)$ 用 [ε] 替代. $N^{Al_2O_3}$ 就是每单位体积 Al_2O_3 分子的数目. 从方程(3.2-24)可得

$$\frac{\Delta E_{Al}}{\Delta E_{O}} = \frac{[\varepsilon]_{Al}^{Al_2O_3}}{[\varepsilon]_{O}^{Al_2O_3}} \tag{3.2-26}$$

这个比值一般对化合物组合和布喇格规则实用性都不灵敏，因为铝、氧和三氧化铝的阻止截面形状很相似. 此值与化合物所包含的原子质量有关，在 0.9 和 1.1 之间变化.

粒子自表面散射的信号高度可以写成

$$H_{Al} = Q\Omega\sigma_{Al}N_{Al}^{Al_2O_3}\delta x^{Al_2O_3}$$

$$H_{Al} = Q\Omega\sigma_{Al}\frac{\delta E_1}{[\varepsilon]_{Al}^{Al_2O_3}}\left(\frac{N_{Al}^{Al_2O_3}}{N^{Al_2O_3}}\right) \tag{3.2-27}$$

$$H_{O} = Q\Omega\sigma_{O}\frac{\delta E_1}{[\varepsilon]_{O}^{Al_2O_3}}\left(\frac{N_{O}^{Al_2O_3}}{N^{Al_2O_3}}\right) \tag{3.2-28}$$

式中 $N_{Al}^{Al_2O_3}$(或 $N_{O}^{Al_2O_3}$)是 Al_2O_3 样品中每单位体积的铝(或氧)原子数目. 由于每个分子有 2 个铝原子和 3 个氧原子，故比率 $N_{Al}^{Al_2O_3}/N^{Al_2O_3}$ 和 $N_{O}^{Al_2O_3}/N^{Al_2O_3}$ 分别等 2 和 3. 两者谱的高度比是

$$\frac{H_{Al}}{H_{O}} = \frac{\sigma_{Al}}{\sigma_{O}}\frac{[\varepsilon]_{O}^{Al_2O_3}}{[\varepsilon]_{Al}^{Al_2O_3}}\left(\frac{N_{Al}^{Al_2O_3}}{N_{O}^{Al_2O_3}}\right) \tag{3.2-29}$$

最后一项 $(N_{Al}^{Al_2O_3}/N_O^{Al_2O_3}) = 2/3$ 是靶中铝对氧的原子浓度比．还可以从（3.2—26）式所定义的信号面积推出浓度比．铝和氧得到的面积比

$$\frac{A_{Al}}{A_O} = \frac{\sigma_{Al}}{\sigma_O}\frac{N_{Al}^{Al_2O_3}}{N_O^{Al_2O_3}} \tag{3.2-30}$$

如果薄片较厚，σ_{Al}、σ_O 和 $[\varepsilon]$ 都不能在一给定的能量求出．这时必须进行数值积分，或者如（3.2-6）式所示求 σ 和 $[\varepsilon]$ 的平均值．

(2) 衬底上的化合物薄膜

有些情况是化合物包含一个很重的和一个很轻的元素，而衬底上仅含有重的原子．例如在钽衬底上生长 Ta_2O_5 薄膜，谱的氧化部分的高度和面积不能直接准确测量，因为从钽的衬底上有较大的散射本底，图 3.2-8 给出其背散射谱示意图． 测得 ΔE_{Ta} 和计算 $[\varepsilon]_{Ta}^{Ta_2O_5}$ 可以得到厚度

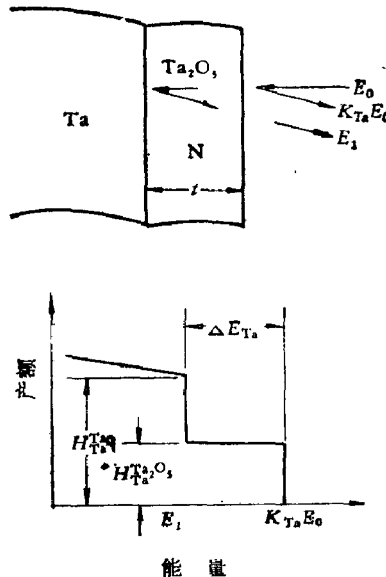


图 3.2-8 在钽元素衬底上的 Ta_2O_5 薄膜的厚度和组分的分析示意图

$$N^{Ta_2O_5}{}_{t} = \frac{\Delta E_{Ta}}{[\varepsilon]_{Ta}^{Ta_2O_5}} \tag{3.2-31}$$

比较粒子在界面处为衬底钽和 Ta_2O_5 化合物散射所产生的信号高度 H_{Ta}^{Ta} 和 $H_{Ta}^{Ta_2O_5}$，就可得到薄膜的浓度比. 类似(3.2-16)和(3.2-29)式可得

$$\frac{H_{Ta}^{Ta_2O_5}}{H_{Ta}^{Ta}} = \frac{[\varepsilon]_{Ta}^{Ta}}{[\varepsilon]_{Ta}^{Ta_2O_5}} \frac{N_{Ta}^{Ta_2O_5}}{N_{Ta}^{Ta}} \tag{3.2-32}$$

此式没有(3.2-29)式的散射截面也没有(3.2-26)式中的能量宽度比,因为散射物质 Ta 不变而只是其排列有变化.

为了说明问题,我们来考察 2.0 兆电子伏 ^{4}He 离子在硅衬底上热生长 SiO_2 薄膜的背散射谱，如图 3.2-9 所示. 分析束流是 15 毫微安，总剂量为 10 微库是用带电流积分仪的法拉第筒测得

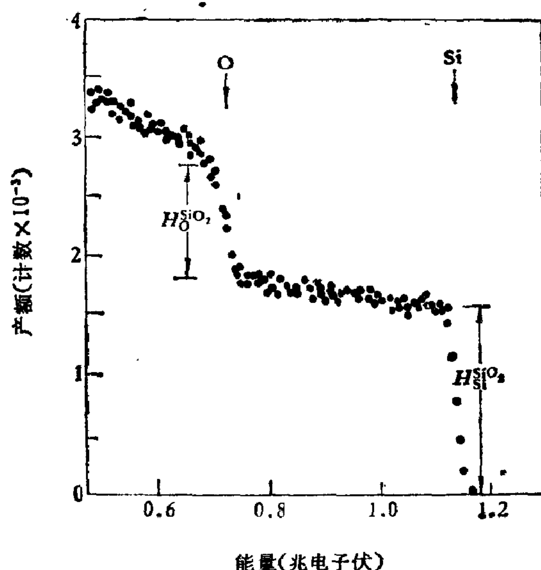


图 3.2-9 2.0 兆电子伏 ^{4}He 离子入射到 SiO_2 样品上的背散射谱，垂直入射，$\theta = 170°$ $\Omega = 4.11$ msr，$Q = 10$ 微库 $= 6.25 \times 10^{13}$ 离子，$\delta E_1 = 5.4$ 千电子伏

的. 从谱中确定信号高度 $H_{Si}^{SiO_2}$ 和 $H_O^{SiO_2}$ 分别 1500 和 980 计数.

有两种等效的方式使用布喇格线性相加原理来处理介质的阻

止截面：(i) 以分子为基础考虑每个 SiO_2 分子的阻止截面

$$\varepsilon^{SiO_2}=\varepsilon^{Si}+2\varepsilon^{O} \tag{3.2-33}$$

(ii) 以原子为基础，把它们作为混合物

$$\varepsilon^{Si_mO_{1-m}}=0.33\varepsilon^{Si}+0.66\varepsilon^{O} \tag{3.2-33a}$$

其中 $m=0.33$，从而考虑分子内每个原子的有效截面. 图 3.2-10 给出这两种方式的有效截面. 在垂直入射时，从分子角度考虑氧的信号高度是

$$H_{O,O}^{SiO_2}=\sigma_O(E_0)\Omega Q\frac{N_O^{SiO_2}}{N^{SiO_2}}\frac{\delta E_1}{[\varepsilon_O]_O^{SiO_2}} \tag{3.2-34}$$

其中 $(N_O^{SiO_2}/N^{SiO_2})=2$，因为每个 SiO_2 分子中有两个氧原子. 而从原子的角度考虑，混合物 Si_mO_{1-m} 中氧信号的高度是

$$H_{O,O}^{Si_mO_{1-m}}=\sigma_O(E_0)\Omega Q\frac{N_O^{Si_mO_{1-m}}}{N^{Si_mO_{1-m}}}\frac{\delta E_1}{[\varepsilon_0]_O^{Si_mO_{1-m}}} \tag{3.2-34a}$$

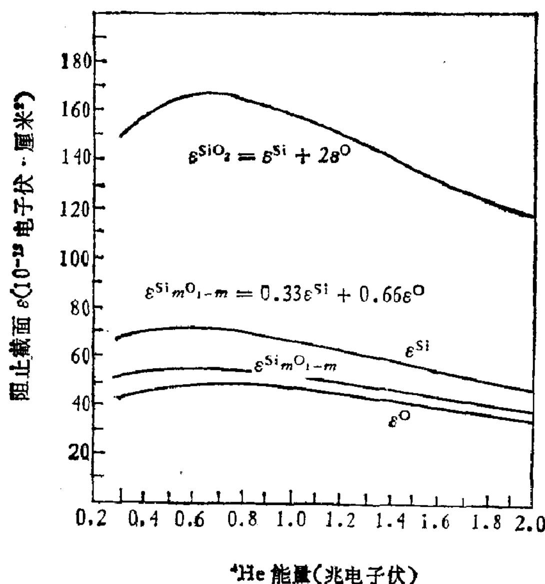


图 3.2-10 ⁴He 离子在 Si，O 和 SiO_2 中的阻止截面. 二氧化硅的截面是从 ε^{SiO_2} 和 $\varepsilon^{Si_mO_{1-m}}$ 两种角度来作线性相加的

其中 $(N_O^{Si_mO_{1-m}}/N^{Si_mO_{1-m}})=0.66$. 由于 $[\varepsilon_0]_O^{Si_mO_{1-m}}$ 现在是每个原子的有效阻止截面因子，故氧原子浓度必须取 Si_mO_{1-m} 的一个

原子浓度，它是 SiO_2 分子的三倍. 表 3.2-4 给出二氧化硅上述两种方式的 ε, H 和 $[\varepsilon]$ 的表达式.

表 3.2-4 表面能近似下两种不同方式表达 SiO_2 的 ε, H 和 $[\varepsilon]$

分子模式 (SiO_2 的一个分子)	原子模式 (0.33 原子 Si + 0.66 原子氧)
$N^{SiO_2}=2.3\times10^{22}$ 厘米$^{-3}$	$N^{Si_mO_{1-m}}=6.9\times10^{22}$ 厘米$^{-3}$
$N_O^{SiO_2}=4.6\times10^{22}$ 厘米$^{-3}$	$N_O^{Si_mO_{1-m}}=4.6\times10^{22}$ 厘米$^{-3}$
$\varepsilon^{SiO_2}=\varepsilon^{Si}+2\varepsilon^{O}$	$\varepsilon^{Si_mO_{1-m}}=0.33\varepsilon^{Si}+0.66\varepsilon^{O}$
$[\varepsilon_0]_{Si}^{SiO_2}=226\times10^{-15}$ 电子伏·厘米^2	$[\varepsilon_0]_{Si}^{Si_mO_{1-m}}=75.3\times10^{-15}$ 电子伏·厘米^2
$[\varepsilon_0]_O^{SiO_2}=213\times10^{-15}$ 电子伏·厘米^2	$[\varepsilon_0]_O^{Si_mO_{1-m}}=71.0\times10^{-15}$ 电子伏·厘米^2
$H_{Si}^{SiO_2}=\sigma_{Si}\Omega Q\dfrac{\delta E_1}{[\varepsilon_0]_{Si}^{SiO_2}}=1522$	$H_{Si}^{Si_mO_{1-m}}=0.33\sigma_{Si}\Omega Q\dfrac{\delta E_1}{[\varepsilon_0]_{Si}^{Si_mO_{1-m}}}=1522$
$H_O^{SiO_2}=2\sigma_O\Omega Q\dfrac{\delta E_1}{[\varepsilon_0]_O^{SiO_2}}=966$	$H_O^{Si_mO_{1-m}}=0.66\sigma_O\Omega Q\dfrac{\delta E_1}{[\varepsilon_0]_O^{Si_mO_{1-m}}}=966$

另外，在图 3.2-11 中，类似 (3.2-31) 式，用阻止截面因子可很快算出二氧化硅薄膜厚度：

$$\begin{aligned} Nt &= \Delta E_{Si}/[\varepsilon_0]_{Si}^{SiO_2}=\Delta E_{Si}/(226\\ &\quad\times10^{-15})\ \text{电子伏·厘米}^2\\ Nt &= \Delta E_O/[\varepsilon_0]_O^{SiO_2}=\Delta E_O/(213\\ &\quad\times10^{-15})\ \text{电子伏·厘米}^2 \end{aligned} \qquad (3.2\text{-}35)$$

式中阻止截面是从分子角度来考察的并从表 3.2-4 得到. 从图 3.2-11 得到 $\Delta E_{Si}=262$ 千电子伏和 $\Delta E_O=238$ 千电子伏. 由 (3.2-35) 两式可分别计 ΔE_{Si} 的 Nt 是 1.16×10^{18} 分子/厘米^2，ΔE_O 的 Nt 是 1.12×10^{18} 分子/厘米^2. 两者的平均值 1.14×10^{18} SiO_2/厘米^2，相当于 5000 埃厚的 SiO_2 膜，不过这时假定氧化硅膜的密度同本体二氧化硅密度一样，均是 $2.28\times10^{22}SiO_2$ 分子/厘米^3.

(3) 含有化合物夹层的分析(用能量损失比法)

能量损失比法求散射前夕的能量 E，是假定粒子在靶中散射

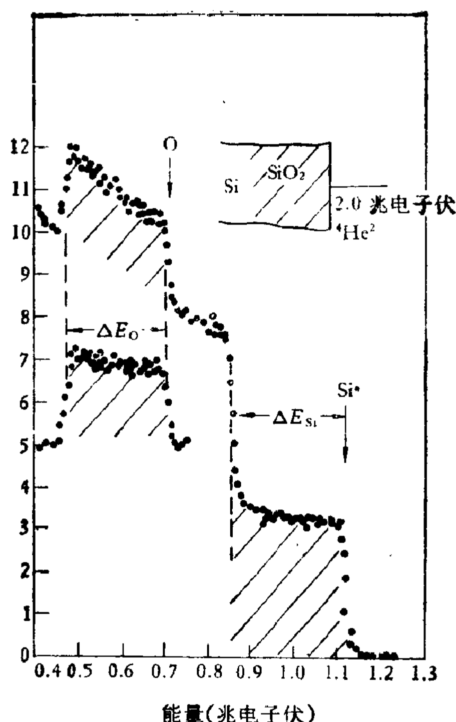


图 3.2-11　2.0 兆电子伏 ^4He 离子入射到硅衬底上热生长 5000Å 厚的 SiO_2 膜的背散射谱[4]

后向外路径损失的能量 ΔE_{out} 和散射前向里路径损失的能量 ΔE_{in} 之比 $\alpha = \dfrac{\Delta E_{out}}{\Delta E_{in}}$ 与深度无关，也即

$$\alpha = \frac{\Delta E_{out}}{\Delta E_{in}} = \text{常数} \tag{3.2-36}$$

见图 3.1-10， 能量损失 $\Delta E_{out} = KE - E_1$ 和 $\Delta E_{in} = E_0 - E$. 所以，$\alpha = (KE - E_1)(E_0 - E)$，

$$E = (E_1 + \alpha E_0)(K + \alpha) \tag{3.2-37}$$

α 的近似值可从表面能近似中确定. 假定 (3.1-12) 和 (3.1-13) 式可分别写成 $x/\cos\theta_1 = (E_0 - E)/\varepsilon(E_0)N$ 和 $x/\cos\theta_2 = (KE_0 - E_1)/\varepsilon(KE_0)N$，则有

$$\alpha \simeq [\varepsilon(KE_0)/\varepsilon(E_0)] \frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2} \qquad (3.2-38)$$

查阻止截面表很容易得到α值，然后代入(3.2-37)式即找到 E. 它特别适用于薄膜分析，因为此时表面能近似是适用的. 同样也可用到多层膜的情况以确定在各种介面散射前的能量. 由于粒子在向外路径和向里路径所走的路程相同，所以，虽然不同层的组分不同，但α值变化不大. 图 3.2-12 是镍膜和衬底硅之间有一 Ni_2Si

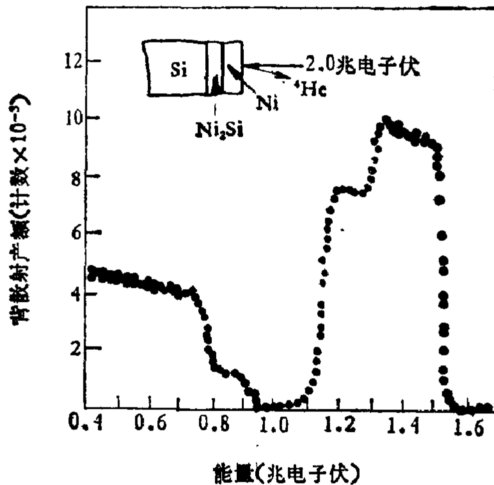


图 3.2-12 2.0 兆电子伏 ^4He 离子入射到具有 Ni_2Si 夹层多层膜样品上背散射谱[6]

表 3.2-5 用能量损失比法计算图 3.2-12 谱散射前夕能量 E ($\alpha_{Ni}=1.11$ 和 $\alpha_{Si}=1.29$)

位　　置	散射元素	E_1 (千电子伏)	$E_1+\alpha E_0$ (千电子伏)	E (千电子伏)
Ni 表面	Ni	1525	3745	2000
Ni/Ni_2Si 界面	Ni	1310	3530	1885
Ni_2Si/Si 界面	Ni	1140	3360	1794
Ni/Ni_2Si 界面	Si	930	3510	1896
Ni_2Si/Si 界面	Si	780	3360	1810

夹层的背散射谱[6]. 硅化物的存在使 Ni 和 Si 谱均下降成一个

台阶．当 $\alpha_{Ni}=1.11$ 和 $\alpha_{Si}=1.29$ 时，由(3.2-37)式可算出在各界面散射前的能量 E，列于表 3.2-5．可见，在 Si/Ni_2Si 界面处的能量和 Ni 及 Si 原子散射计算的能量符合得相当好．

三 混合物的分析

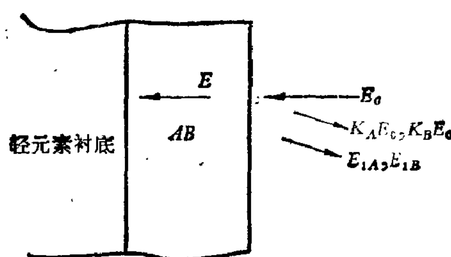
若一个固体样品由两种元素 A 和 B 混合而成，并且其浓度随深度变化．我们可以采用已经用过的各种符号和公式加以适当的修正来处理这类问题．

(1) 接近表面的分析

在图 3.2-13 中，由上一节讨论可知

$$H_A^{AB}=Q\Omega\sigma_A N_A^{AB}\frac{\delta E_1}{[S]_A^{AB}} \qquad (3.2\text{-}39a)$$

$$=Q\Omega\sigma_A\frac{\delta E_1}{[\varepsilon]_A^{AB}}\frac{N_A^{AB}}{N^{AB}} \qquad (3.2\text{-}39b)$$



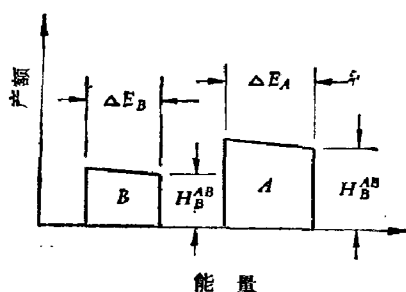


图 3.2-13 A 和 B 两种元素混合物背散射谱分析示意图

式中 H_A^{AB} 是混合物 AB 在表面处自 A 原子散射粒子能谱的高度. 混合物中 A 和 B 的原子浓度分别是 N_A^{AB} 和 N_B^{AB}，而总浓度为 N^{AB}. 因此

$$N^{AB} = N_A^{AB} + N_B^{AB} \tag{3.2-40}$$

部分浓度

$$C_A = \frac{N_A^{AB}}{N^{AB}} \tag{3.2-40a}$$

这种混合物的阻止截面由布喇格规则得到

$$\varepsilon^{AB} = \frac{N_A^{AB}}{N^{AB}}\varepsilon^A + \frac{N_B^{AB}}{N^{AB}}\varepsilon^B = C_A\varepsilon^A + C_B\varepsilon^B \tag{3.2-41}$$

此方程与(3.2-23)式有所不同. 在(3.2-23)式中 $\varepsilon^{Al_2O_3}$ 是一给定分子 Al_2O_3 的阻止截面，而(3.2-41)式中 ε^{AB} 是混合物中一给定位置处具有权重因子 C_A 和 C_B 的每个原子的权重平均阻止截面. 因此

$$[\varepsilon]_A^{AB} = K_A\varepsilon^{AB}(E_0) + \frac{1}{|\cos\theta|}\varepsilon^{AB}(K_AE_0) \tag{3.2-42}$$

$$[S]_A^{AB} = N^{AB}[\varepsilon]_A^{AB} \tag{3.2-43}$$

这种分析的目的就是要从高度或高度比中得到原子浓度. 如果有纯元素 A 的标准样品，问题要简化得多. 纯标准靶 A 表面散射粒子所产生的背散射谱的高度可以从(3.1-41)式得到

$$H_A^A = Q\Omega\sigma_A\frac{\delta E_1}{[\varepsilon]_A^A} \tag{3.2-44}$$

从方程(3.2-41)和(3.2-44)得到高度比

$$\frac{H_A^{AB}}{H_A^A} = \frac{N_A^{AB}}{N^{AB}}\frac{[\varepsilon]_A^A}{[\varepsilon]_A^{AB}} = C_A\frac{[\varepsilon]_A^A}{[\varepsilon]_A^{AB}} \tag{3.2-45}$$

以及 H_A^{AB} 和 H_B^{AB} 的高度比

$$\frac{H_A^{AB}}{H_B^{AB}} = \frac{N_A^{AB}}{N_B^{AB}}\frac{\sigma_A}{\sigma_B}\frac{[\varepsilon]_B^{AB}}{[\varepsilon]_A^{AB}} = \frac{C_A}{C_B}\frac{\sigma_A}{\sigma_B}\frac{[\varepsilon]_B^{AB}}{[\varepsilon]_A^{AB}} \tag{3.2-46}$$

由于(3.2-41)式给出了 $[\varepsilon]$，故可从上面两方程中任一个确定表面浓度 C_A（或 C_A/C_B）。

(2) 浓度剖析

在一级近似下，把单元素靶 B 中含有另一元素 A 的浓度剖析，看成是上述表面分析的一种迭代. 与表面分析类似，我们可以取探测能量 E_{1A} 的重杂质 A 的信号高度 H_A^{AB}，E_{1A} 相当于深度 x 处散射事件发生前夕的能量 E，然后把 H_A^{AB} 同纯的单元素靶 A 在 E'_{1A} 测量的信号高度加以比较，此时 E'_{1A} 对应于深度 x' 处散射前夕的相同能量 E. 图3.2-14给出所有符号. 两者谱高度比率可近似写成

$$\frac{H_A^{AB}(E_{1A})}{H_A^A(E'_{1A})}=C_A(x)\ \frac{[\varepsilon(E)]_A^A}{[\varepsilon(E)]_A^{AB}} \tag{3.2-47}$$

和

$$\frac{H_A^{AB}(E_{1A})}{H_B^{AB}(E_{1B})}=\frac{\sigma_A(E)}{\sigma_B(E)}\frac{[\varepsilon(E)]_B^{AB}}{[\varepsilon(E)]_A^{AB}}\frac{N_A^{AB}(x)}{N_B^{AB}(x)} \tag{3.2-48}$$

方程(3.2-49)和方程(3.2-45)有几点不同:

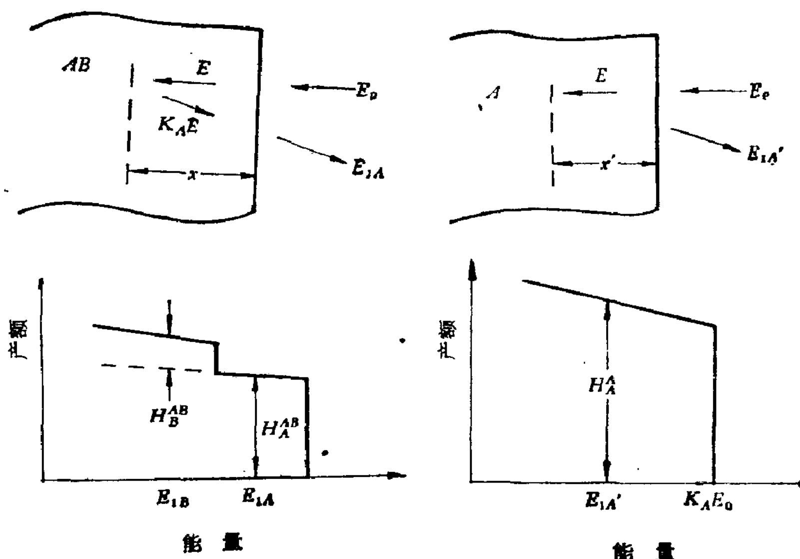


图3.2-14 混合物 AB 和纯元素 A 背散射谱的高度比示意图

(i) 在方程(3.2-47)中虽然深度不同，探测能量不同，但两者高度均是在散射发生前夕相同能量 E 处求得的.

(ii) 从计算中得到的 $C_A(x)$ 是深度 x 处元素 A 的局部浓度比.

(iii) 在能量 E 而不是 E_0 处求 $[\varepsilon]$ 的值.

(3.2-49) 和 (3.2-48) 式都是近似的，因为没有考虑靶内靶外能量宽度之差所引起的修正. 对高度比来说，这种修正大约 5%左右.

(3) 铝铜合金

对于铝铜合金构成混合物 $Al_{1-m}Cu_m$，其中铜和铝的原子比 $m/(1-m)$. 可把 $Al_{1-m}Cu_m$ 简写成 AlCu. 阻止截面根据布喇格规则有

$$\varepsilon^{AlCu} = (1-m)\varepsilon^{Al} + m\varepsilon^{Cu} \qquad (3.2-49)$$

于是铜和铝在 $Al_{1-m}Cu_m$ 背散射谱(如图 3.2-15)的信号高度比是

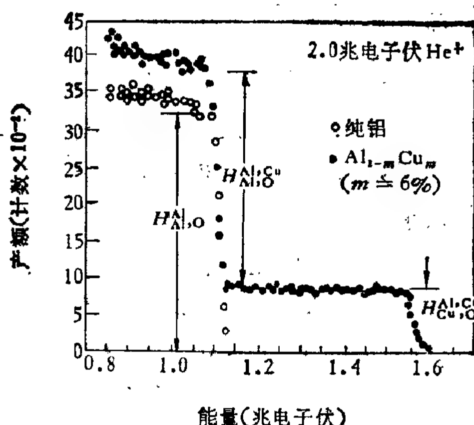


图 3.2-15 2.0 千电子伏 ⁴He 离子入射到 Al 样品(○)和 Al 含6% Cu 样品(●)的背散射谱. 测量参数是: $\theta = 170°$, $\Omega = 4.11$ msr, $\delta E = 5$(千电子伏) $Q = 10$ 微库 $= 6.25\times10^{13}$ 离子[7]

$$\frac{H^{AlCu}_{Cu,0}}{H^{AlCu}_{Al,0}}=\frac{m}{1-m}\frac{\sigma_{Cu}}{\sigma_{Al}}\frac{[\varepsilon]^{AlCu}_{Al}}{[\varepsilon]^{AlCu}_{Cu}} \tag{3.2-50}$$

诚然，如前一样，上标 AlCu 表示阻止物质，下标表示碰撞原子 Al 或 Cu. 假定自相同介质中不同元素散射粒子的 [ε] 比率接近于 1 且不因原子浓度比的变化而改变很大. 因此，先可令[ε]比率等于 1 来确定 m 和 $1-m$ 的零级值，再用 m 和 $1-m$ 零级值来计算 [ε] 较好的值，又把它放入(3.2-50)式求出新的 m 和 $1-m$ 值. 一次迭代使其改变百分之几.

但在计算不同结构中相同元素的信号高度比时，则不能把[ε]比率看成是 1. 例如，AlCu 中的 Al 高度对 Al 的高度比是

$$\frac{H^{AlCu}_{Al,0}}{H^{Al}_{Al,0}}=(1-m)\frac{[\varepsilon_0]^{Al}_{Al}}{[\varepsilon_0]^{AlCu}_{Al}} \tag{3.2-51}$$

由图 3.2-15 能谱，组分是 $m=0.06$[7]，但测得的比率 $H^{AlCu}/H_{Al}=0.90$；这意味着，如果[ε]比率为 1 则有 $m=0.10$. 也即是说，如果不考虑阻止截面的变化. 误差接近一倍.

四 杂质的深度分布

(1) 离子注入样品

背散射谱学首先应用于半导体问题的就是研究离子注入过程. 关于离子注入方法对材料的改性及对半导体器件的应用将在第七章中论述. 这里只举一个简单例子说明背散射谱学在研究注入剂量、射程剖析、杂质原子定位和损伤分析中的作用. 图 3.2-16 是 2.0 兆电子伏 ^{4}He 离子自硅靶的背散射谱，而硅靶以 250 千电子伏的 ^{75}As 离子注入，注入剂量达 1.2×10^{15} 原子/厘米^2. 硅的信号是一个平台状，前沿为 1.13 兆电子伏，砷的信号(图中已放大给出)是高斯分布，其峰值在 1.55 兆电子伏及 FWHM 为 60 千电子伏. 峰位比表面处砷能量边缘 $K_{As}E_0=1.618$ 兆电子伏向低的方向位移了 $\Delta E_{As}=68$ 千电子伏. 表 3.2-6 给出图 3.2-16 测得的数据.

从图 3.2-16 可以进行零级近似分析，即表面能近似，并计算

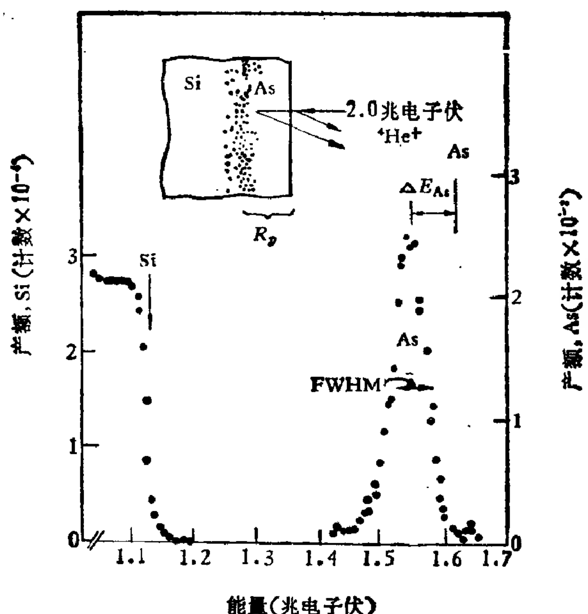


图 3.2-16　2.0 兆电子伏 $^4He^+$ 自硅晶上背散射谱. 硅晶注入了剂量为 1.2×10^{15} 砷原子/厘米²的砷，注入能量为 250 千电子伏. 竖箭头表示 ^{28}Si 和 ^{75}As 表面原子散射的粒子能量[8]

出剂量、射程和砷在硅中的射程分布. 若注入层很浅，计算阻止截面和微分散射截面可以采用表面能近似，把注入的砷看成是表面杂质，用方程 (3.2-14) 计算注入剂量. 即

$$(Nt)_{As}=\frac{A_{As}}{H_{Si}}\frac{\sigma_{Si}(E_0)}{\sigma_{As}(E_0)}\frac{\delta E_1}{[\varepsilon]_{Si}}=1.2\times10^{15}\text{ 砷原子/厘米}^2 \quad (3.2\text{-}52)$$

与注入剂量的标称值符合.

从背散射谱中砷信号峰的高度可以估计出砷在硅中的最大浓度. 根据 (3.2-48) 式和表 3.2-6 的数据可得，

$$\frac{N_{As}}{N_{Si}}=\frac{H_{As}}{H_{Si}}\frac{\sigma_{Si}(E_0)}{\sigma_{As}(E_0)}\frac{[\varepsilon_0]_{As}^{Si}}{[\varepsilon_0]_{Si}^{Si}}=0.166\% \qquad (3.2\text{-}53)$$

因为 $N_{Si}=4.78\times10^{22}$ 原子/厘米³，所以 $N_{As}=8.3\times10^{19}$ 原子/厘米².

要得到浓度剖面，就要用到阻止截面因子 $[\varepsilon_0]_{As}^{Si}$，砷的峰位在

表 3.2-6 根据表面能近似从图 3.2-16 得到的数据*)

数据	参数
$H_{Si,0}=27000$ 计数	$[\varepsilon_0]^{Si}_{Si}=92.6\times10^{-15}$ 电子伏·厘米^2
$H^{Si}_{As}=250$ 计数(峰值处)	$[\varepsilon_0]^{Si}_{As}=95.3\times10^{-15}$电子伏·厘米^2
$A_{As}=3350$ 计数	$\sigma_{As}=1.425\times10^{-24}$ 厘米^2
$\Delta E_{As}=68$ 千电子伏	$\sigma_{Si}=0.248\times10^{-24}$ 厘米^2
$(FWHM)_{As}=60$ 千电子伏	$K_{As}=0.809$
	$K_{Si}=0.566$

*) $E_0=2.0$ 兆电子伏,垂直入射,散射角 $\theta=170$ 及 $\delta E=5.0$ 千电子伏.

表面边缘向低能端位移了 $\Delta E_{As}=68$ 千电子伏,且

$$N_{Si}R_p=\frac{\Delta E}{[\varepsilon_0]^{Si}_{As}}=7.14\times10^{17}\text{ 原子/厘米}^2 \quad (3.2-54)$$

式中 R_p 是注入砷的投影射程. 由于 $N_{Si}=4.98\times10^{22}$ 原子/厘米^2,则可得 $R_p=1430$ 埃.

当注入分布为高斯分布时,深度剖面可用投影射程 R_p 和射程离散 ΔR_p 来表述,其中射程离散 ΔR_p 是深度高斯分布的标准偏差. 标准偏差同高斯分布最大值的半宽度 FWHM 关系是

$$\begin{aligned}\text{FWHM}&=2(2\ln 2)^{\frac{1}{2}}\times(\text{标准偏差})\\&=2.355\times(\text{标准偏差})\end{aligned} \quad (3.2-55)$$

测得砷能谱的 FWHM 为 60 千电子伏,它不仅是砷的深度分布而且是背散射系统的能量分辨率和 ^{4}He 的能量离散.

背散射系统的能量分辨率还可以从图 3.2-16 中硅谱平台边缘的斜率得到. 如果将接近硅表面的平台边缘微分,则可得到负的高斯分布(负值是因产额随能量增加而减小),那么,这个负的高斯分布的 FWHM 就是背散射系统的分辨率. 如果测量硅谱台阶从 12% 到 88% 的高度算作能量展宽,其为 22 千电子伏. ^{4}He 离子在硅中的能量离散可从玻尔理论(见第二章的 § 2.6) 估计出,在注入区约为 3.2 千电子伏,于是,能量离散的 FWHM 是 2.355 × 3.2 千电子伏=7.5 千电子伏.

还需要从测得砷的 FWHM 去掉测得系统分辨率 FWHM (22 千电子伏)和能量离散 (7.5 千电子伏), 假定这三个分布均是

高斯型，故叠加过程就是均方相减：

$$\text{FWHM (修正的)} = [(60)^2 - (22)^2 - (7.5)^2]^{1/2}$$
$$= 55.3\ (\text{千电子伏}) \qquad (3.2\text{-}56)$$

此值代表砷在硅中实际的能量展宽．用(3.2-54)式很容易把其转化为深度刻度

$$\Delta R_p = \text{FWHM(修正的)}/2.355\,N[\varepsilon_0]_{As}^{Si} = 500\,\text{Å} \qquad (3.2\text{-}57)$$

如果采用平均能量近似(3.1-24)和(3.1-25)式，则有

$$[\bar{\varepsilon}]_{As}^{Si} = K_{As}\varepsilon(\bar{E}_{in}) + \frac{1}{\cos\theta_2}\varepsilon(\bar{E}_{out}) \qquad (3.2\text{-}58)$$

式中 $\bar{E}_{in} = \frac{1}{2}(E + E_0)$ 和 $\bar{E}_{out} = \frac{1}{2}(E_1 + KE)$，$E$ 为散射前夕的能量．平均能量 $\bar{E}_{in}$ 和 $\bar{E}_{out}$ 可由对称平均能量近似得到

$$\bar{E}_{in} = E_0 - \frac{1}{4}\Delta E = E_0 - \frac{1}{2}NR_p\varepsilon(E_0)$$
$$= 1982\ \text{千电子伏} \qquad (3.2\text{-}59a)$$

$$\bar{E}_{out} = E_1 + \frac{1}{4}\Delta E = E_1 + \frac{1}{2}NR_p\varepsilon(E_1)$$
$$= 1569\ \text{千电子伏} \qquad (3.2\text{-}59b)$$

把这两数值代入(3.2-58)式得 $[\bar{\varepsilon}]_{As}^{Si} = 97.1 \times 10^{15}$ 电子伏·厘米^2．这比表面能近似计算的阻止截面只大 2%．因此，射程和射程离散比前面要低 2%．

用表面能近似和平均能近似两种方法分析的结果汇于表 3.2-7，两者相差很小．因此，注入层很浅时，用表面能近似分析深度分布是足够的，因为 ΔE 比 E 小且 ε 随 ΔE 变化很小．(3.2-52)式中的 σ_{Si} 和 σ_{As} 是在表面能量 $E_0 = 2.0$ 兆电子伏处求得的．由于砷信号面积 A_{As} 是分布在一个能量区间，故应在不同的能量下求出 A_{As}．若把 σ_{As} 固定，就应在 E 处而不是在 E_0 处求 σ_{As}，所以

$$E = E_0 - NR_p\varepsilon(\bar{E}_{in}) = 1965\ \text{千电子伏} \qquad (3.2\text{-}60)$$

散射截面同能量的关系是

$$\frac{\sigma_{As}(E)}{\sigma_{As}(E_0)} = \frac{E_0^2}{E^2} = 1.018 \qquad (3.2\text{-}61)$$

因此，总注入剂量比表面能 E_0 计算的要低 1.8%.

表 3.2-7　两种近似计算法对图 3.2-16 分析的结果

方法	入射能量（千电子伏）	出射能量（千电子伏）	$[\varepsilon]^{Si}_{As}$ (10^{-15}电子伏·厘米^2)	R_p (Å)	ΔR_p (Å)
表面能近似	$E_0=2000$	$K_{As}E_0=1617$	95.3	1434	500
平均能近似	$\bar{E}_{in}=1982$	$\bar{E}_{out}=1569$	97.1	1406	490

(2) 扩散剖析

在讨论砷注入硅的深度很浅时，表面能近似是可以的．如果要求在表面以下 0.5 微米到 1 微米的杂质分布．就要用平均能近似了．例如，砷注入硅片后又经过了一个扩散过程，情况就和上面有所不同．图 3.2-17 是用 2.4 兆电子伏 ^{4}He 离子对这种样品的背散射谱（总剂量为 20 微库，$\theta_1=0$，$\theta=170°$ 及 $\Omega=4.11$ 毫球

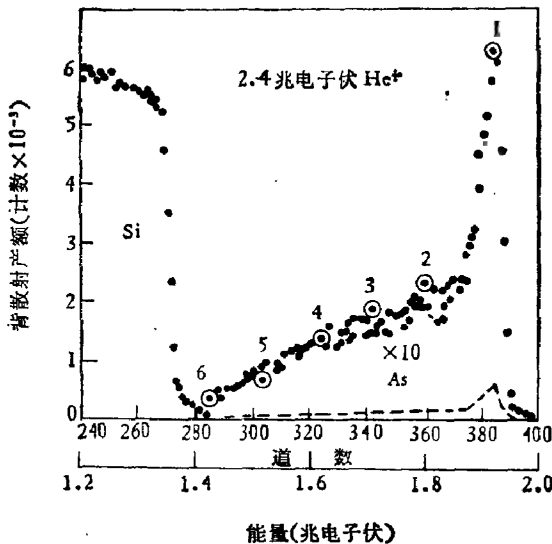


图 3.2-17　2.4 兆电子伏 ^{4}He 入射到剂量 3.4×10^{16} As/厘米^2 注入硅样品上的背散射谱（注入后有一个扩散过程），垂直入射，$\theta=170°$，$\Omega=4.11$ 毫球面度 $Q=20$ 微库 $=1.25\times10^{14}$ 离子

面度，图中将 1.4 兆电子伏到 2.0 兆电子伏的区域放大了 10 倍。砷信号从表面能位置一直向低能区延伸到硅信号的区域. 用(3.2-53)式和表面能近似可在表面区域将 As 信号的高度转换成 N_{As}，而在较深的区域应进行修正.

由图 3.2-17 背散射能谱的数据计算出 $N_{As}(x)$示于图 3.2-18，其深度标度是用数值计算散射前每个能量 E 的能量损失和散射截面以及散射后的能量损失得到的. 为了求探测能量 E_1 处 As 信号高度 $H_{As}(E_1)$，将(3.2-46)式写成:

$$H_{As}(E_1)=\sigma_{As}(E)\Omega Q\frac{N_{As}(x)}{N_{Si}}\frac{\delta E_1}{[\varepsilon(E)]^{Si}_{As}}\frac{\varepsilon(K_{As}E)}{\varepsilon(E_1)}\quad(3.2-62)$$

其中 $[\varepsilon(E)]^{Si}_{As}$ 是散射前夕能量 E 处求得的阻止截面因子，且

$$\frac{\varepsilon(K_{As}E)}{\varepsilon(E_1)}$$

随深度不同作修正.

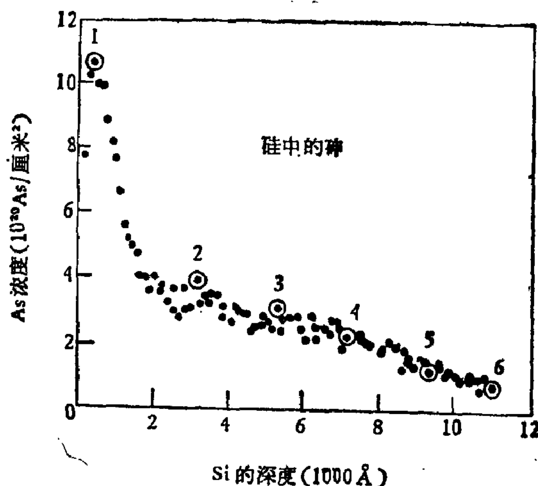


图 3.2-18 用(3.2-62)式计算砷在硅中的浓度 N_{As} 随深度的变化(数据是由图 3.2-17 背散射得到的). 编号的点对应于图 3.2-17 中的位置

由方程(3.2-53)表面能近似和方程(3.2-62)计算图 3.2-17 中各标记点的深度和浓度 N_{As} 列于表 3.2-8. 两者结果比较表明，用

表 3.2-8 分别用表面能近似(SE)和(3.2-62)式计算
图 3.2-17 各标记点砷在硅中的深度分布

标记点	ΔE_{As} (千电子伏)	H_{As} (计数)	深度(1000Å)		N_{As} (10^{20}/厘米^3)	
			SE*)	方程(3.2-62)	SE**)	方程(3.2-62)
2	135	232	3.1	3.17	3.97	3.91
3	230	188	5.29	5.25	3.22	3.1
4	320	136	7.36	7.17	2.33	2.25
5	420	65	9.66	9.25	1.11	1.1
6	510	40	11.7	11.0	0.68	0.70

*) 深度 $=\Delta E/[S_0]_{Å}^{Si}$，其中 $[S_0]_{Å}^{Si}=43.5$ 电子伏/Å.
**) 由 $N_{As}=(H_{As}/5.85)\times10^{19}$/厘米^{3}的方程(3.2-53)算出.

表面能近似计算砷在硅中深度和浓度时，误差在 5% 以内.

§ 3.3 背散射实验方法和仪器

进行背散射实验的主要过程就是：一个单能离子束(如 $^4He^+$ 或 H^+) 打到靶上而又被靶散射回来，把这些被散射回来离子的一

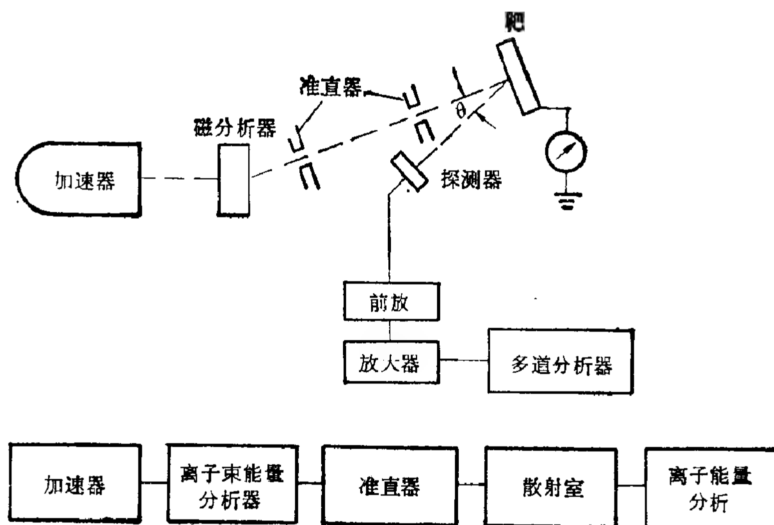


图 3.3-1 离子背散射实验框图

部分进行能量分析和计数，并将数据贮存起来．所以，从实验技术上讲可分为三个组成部分：（i）加速器-离子的产生、加速和能量选择；（ii）靶室-离子散射和探测；（iii）背散射束的能量分析．图 3.3-1 是离子背散射实验安排分为几个基本部分框图．由于这些装置和方法对整个带电粒子同固体相互作用的其它实验研究均是必须的（当然，不同的实验要求不完全一样，实验的几何安排可能不一样），因此，本节将简要说明上述三部分的要求和概貌，详细讨论还需参考有关的文献．

一　加速器

许多小型加速器均可用于背散射研究，正是这一点，人们把这类研究叫做“价值大、花钱不多”的科学研究．加速器的选择取决于实验和对实验的要求．例如，工业上要求测量重复性和快速，用高压倍加器（Crockroft-Walton）；实验室往往不需要大的束流，一般用静电加速器就可以了．大多数实验研究采用静电加速器．最近人们开始广泛采用串级静电加速器．

（1）高压倍加器

高压倍加器是最早采用的一种加速器，用于低能核反应．近年来经过改进已作各种离子源和中子源，进行粒子同固体相互作用和材料科学的研究．它可以产生较强的离子流，电压稳定性也很好，纹波可小到 0.1%，其供电原理如图 3.3-2 所示．两排电容器交叉地同整流管连起来，整流管同时也起开关作用，使输出电压等于电容器数乘变压器电压的最大值．假定在第一半周时，变压器通过二极管 A 向电容器 a 充电；在负半周时，管 A 断路，可是电容器 a 上的电压和变压器的电压联合经过管 B 向电容器 b 充电，在下一个周期的正半周中，又经过管 A 向电容器 a 充电．同时，电容器 b 经过管 A 和管 C 部分地向电容器 c 充电，经过几个周期后，除了电容器 a 以外的各个电容器的电压都提高到 2 伏．所以，最后的输出电压接近 $2n$ 伏，n 为输出端串联的电容器数．高压倍加

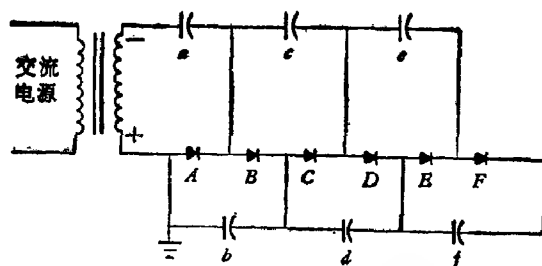


图 3.3-2 高压倍加器供电原理示意图

器可以提供 5—10 毫安的电流.

一般高压倍加器为立式装置. 高压电极用曲率半径大的铝制球壳做成,由绝缘柱支持在空中,和地相距远, 以免电晕放电. 离子源一般都放在高压电极内,离子流从离子源导出后,即在加速管内分段加速. 加速管内各个电极除加速离子外,还起聚焦作用.图 3.3-3 绘出加速管示意图,它是由若干段直径较大的玻璃筒或瓷筒组成,管内装有同轴金属圆筒作为电极,各电极分别和高压输出端的分压电阻各端或电晕放电尖端组成的分压系统相连而得到一定的电势. 当电场强度大于每厘米 1 万伏时, 加速管内易被击穿和放电,而且加速粒子可在管内产生很多的离子和次级电子,从而增加电流负载和引起大量的 X 射线发射. 所以,加速器能量提高时,

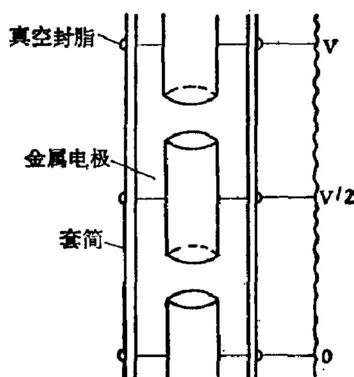


图 3.3-3 高压倍加器加速管一种

聚焦会简单些，但要防止击穿．各段加速管的封接是一个重要问题，否则真空不好要引起气体放电．

(2) 静电加速器

静电加速器是目前在离子束微探测技术中用得较为普遍的一种．它分离子源、加速电压、真空的加速管道、真空系统和控制系统．通常正离子源是加有射频 (rf) 能量的玻璃瓶，使得在瓶中的气体电离．正的等离子体经磁聚焦在瓶出口被阳极正电场推到加速腔中去，如图 3.3-4 所示．加速管中的电场梯度把离子进一步

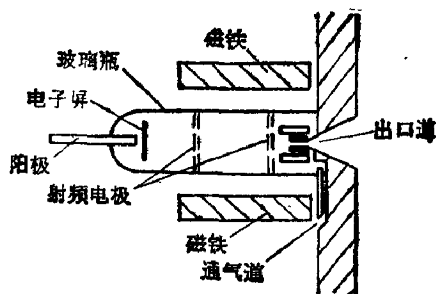


图 3.3-4 射频离子源示意图

加速．图 3.3-5 中快速运行的环带把电荷带到金属球壳内部的收集屏上，再把电荷转移到球上．经过连续不断的运转，金属球对地

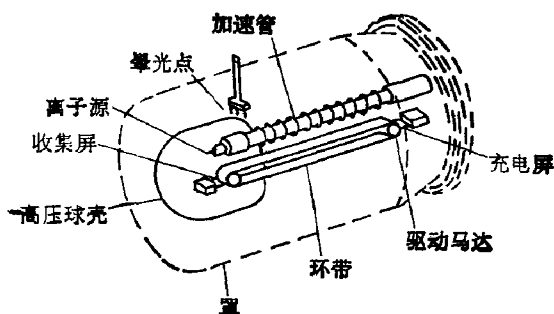


图 3.3-5 静电加速器示意图

的电位达到了一个限度，其数值是由环带转移到球上电荷的速率、晕光放电所引起的漏电流和离子流通过加速管的情况决定的．加速管通常是用绝缘性能良好的玻璃或陶瓷做成．电极的形状是旋压加工成有弯曲度的套筒．加速管正常工作的真空应为 10^{-6} 托(Torr)． 罩内一般充有干燥的 N_2，CO_2 或 SF_6 的气体．离子源一般使用射频 (rf) 离子源，是利用射频振荡电路把射频功率加到离子源上．

(3) 串级静电加速器

图 3.3-6 是小型串级静电加速器的结构示意图． 在离子源中产生负离子，这些负离子受全电位差加速并被吸向高压端，在气体电荷交换格中剥掉电子形成带正电的离子，受到正高压端的排斥并为阳极高压端和地电位的电位差所加速．因此，离子可以获得到的能量是通常的两倍．加速器最大电压达 1 兆伏 (即，He^+ 离子能量为 3.0 兆电子伏)，靶上电流可达 200 毫微安． 其电压是由高频电压倍加源产生的，非常稳定．而且，离子源接近地电位，运行方便，辐射小，体积小，占地面积小，又适用于加速各种高电流离子源和各种离子，因此，串级静电加速器正在迅速发展，逐渐用来替代上述小加速器，而成为研究粒子同固体相互作用、材料科学等重要的分析和改性的工具．

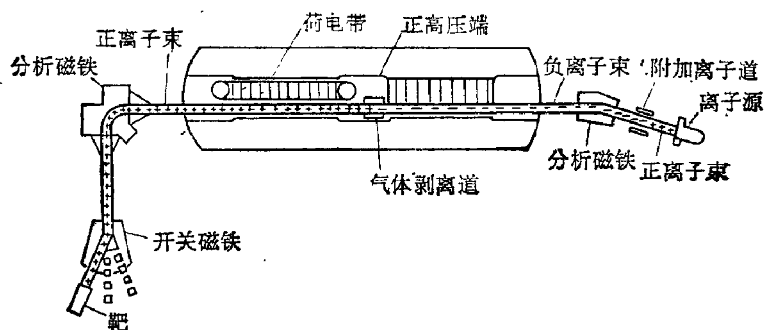


图 3.3-6 串级静电加速器工作原理和结构示意图

图 3.3-7 为通用性串级静电加速器装置的立体图，它适用于核物理、离子注入、活化分析、质子感生 X 射线分析、环境污染检测，辐射损伤研究、束箔谱学及背散射测量等各方面的应用.

二　能量稳定系统

背散射谱仪中需要稳定的接近单能的离子束(对兆电子伏离子而言，能量分散为 ±2 千电子伏). 然而许多因素会引起端电压波动，如静电加速器传动带的荷电过程，电阻绝缘表面和高压支架绝缘体表面的放电等. 如果加一个快速负反馈系统回路可减小这种波动. 其方法有两种：一种是加一个产生伏特计[如图 3.3-8(a)]；另一种是在分析磁铁后的束流线上放置电流灵敏元件[如图 3.3-8(b)].

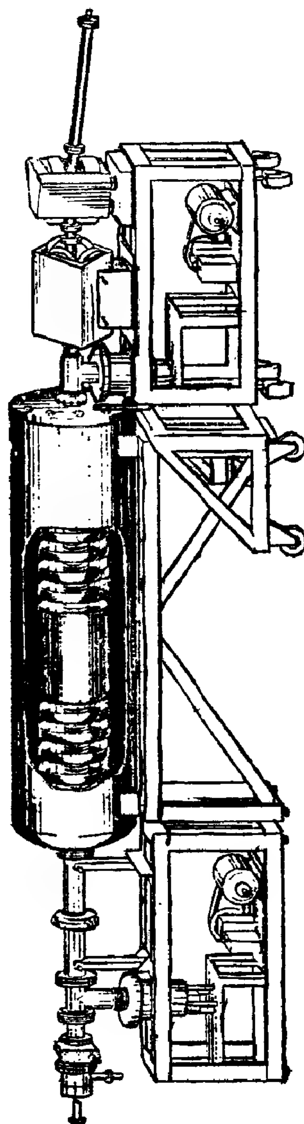


图 3.3-7　适应于各种应用的串级静电加速器装置立体图

产生伏特计在其电路中产生一个正比于端电压的电压. 产生伏特计有一个电机驱动的转子和一固定的绝缘定子. 当转子旋转时即在相邻的定子叶片中静电感应出三角波的交流电压，这电压就正比于端电压，但产生伏特计的精度至少应有 0.05%.

第二个灵敏系统是在分析磁铁后作取样分析系统，即所谓低能和高能窄缝片. 在两种窄缝片上取得的电流信号加以放大，送

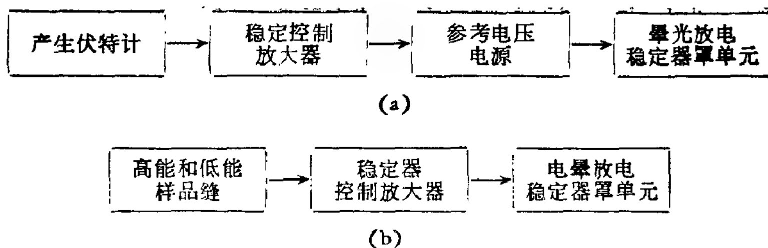


图 3.3-8　能量控制电路框图(a)产生伏特计(b)电流灵敏元件

入负反馈回路，其放大的输出信号用作电晕稳定电路的偏压．在端压高时，束流偏向一边打到高能缝片，于是增加电晕负载电流，从而减小端电压．反之，如果端电压低，束流能量低，偏向另一边打到低能缝片，减少电晕荷载电流，于是增加端电压．这种反馈系统用得更为普遍，许多高压倍加器上也采用这种稳定电路．

三　真空系统

真空系统实际上包括三个主要部分：加速器、束流管道及实验靶室的真空．加速器本身要维持真空可用一种特殊液体的扩散泵；在加速器和分析磁铁之间要有扩散泵或分子泵．由于磁铁有较大的真空抽气阻力，故最好在分析磁铁两边都放有真空泵．如果实验有几个束流管道线，那么每个束流管道上均要装上真空系统，根据实验要求可使用机械泵、扩散泵或分子泵．还要同加速器连在一起装上真空保护系统，使得压力超过 10^{-5}托时，加速器会自动关闭，避免加速管道的放电．

背散射室的要求与具体实验密切相关．有些进行实地研究需要超高真空($<10^{-4}$ 托)．大多数背散射实验研究 10^{-6}托真空就足够了．最简单的通用散射室及其真空系统装置安排如图 3.3-9，即所谓双十字排列，阀门分两层，其中一层的中心有 3 毫米直径的小孔，目的是在某些实验时，散射室需较高真空，可以在散射室和束流管道线之间有一个真空梯度．在接近 10^{-7}托的真空度时一般用魏通（Viton）圆形环接头即可．真空度再高就要用金属密封

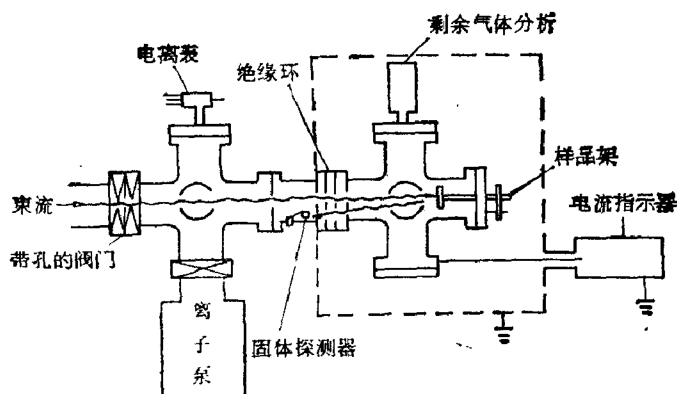


图 3.3-9 散射室及真空系统示意图

垫.

随着微探针技术和离子束分析技术的发展，各种方法的组合形式(如离子背散射及沟道效应,低能电子衍射,俄歇电子谱等)可以精确地确定物质的表面结构. 这时超高真空是必要的. 图 3.3-10 就是一种不锈钢圆筒式超高真空 (UHV) 靶室[9]. 它具有许多窗口，还包括一个直径为 20 厘米的玻璃观察窗. 备有液氮冷

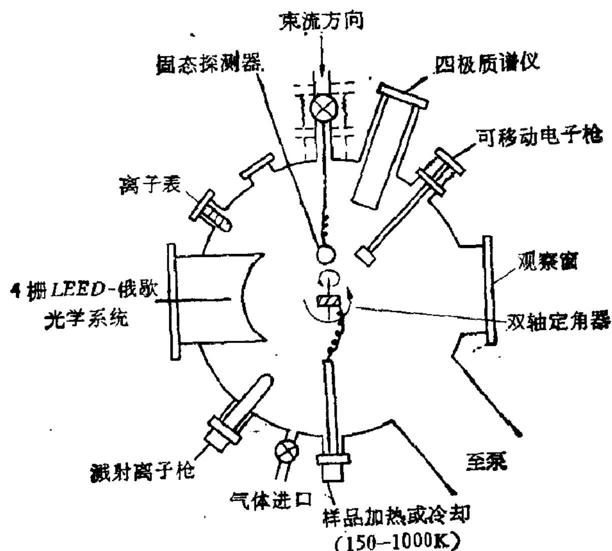


图 3.3-10 超高真空靶室示意图[9]

井，600 升/秒的油扩散泵和钛泵，经一昼夜抽气和 420K 的烘烤，很容易达到 10^{-11} 托或更高的真空.

在靶室各个接口分别装有一个 5 千伏的溅射离子枪，4 栅低能电子衍射（LEED）-俄歇光学系统，裸电离表，四极质谱仪，可移动的电子枪，液氮冷却铜块以及控制靶温度的热阻装置（温度在 150—1000K 范围可调，±2K），固态探测器装在套管上，可线性移动（见图 3.3-11 所示），靶室顶部装有直径为 150 毫米的法兰，配有作三维运动的控制器及两维转动的定角器（见第六章图 6.1-1）等，以便进行综合性实地测量分析.

为了在靶室内获得高的真空度，除了要用图 3.3-10 所示的不锈钢超高真空室外，还要在其同束流管线的连接上采用梯度真空的方式，如图 3.3-11. 从加速器来的离子束流经过入口孔(D_1)，由直径为 4 毫米的管子构成，装有超高真空直通阀（UHV straight-through valve）（图上未画出）. 由直径为 4 毫米的孔（在 D_2 处）把两级抽气系统隔开. 级 2 和靶室之间的连接是由直径为 25 毫米长度为 20 厘米的管子和一个直通阀组成. D_1 和 D_2 孔的大小一方面要保证直径为 1 毫米的离子束顺利通过不受损失，另一方面又要充分地小，以使两级之间的气体流通率很低，从而造成梯度真空，使下一级保持较高的真空度. 这样靶室可达 10^{-11}—10^{-12} 托

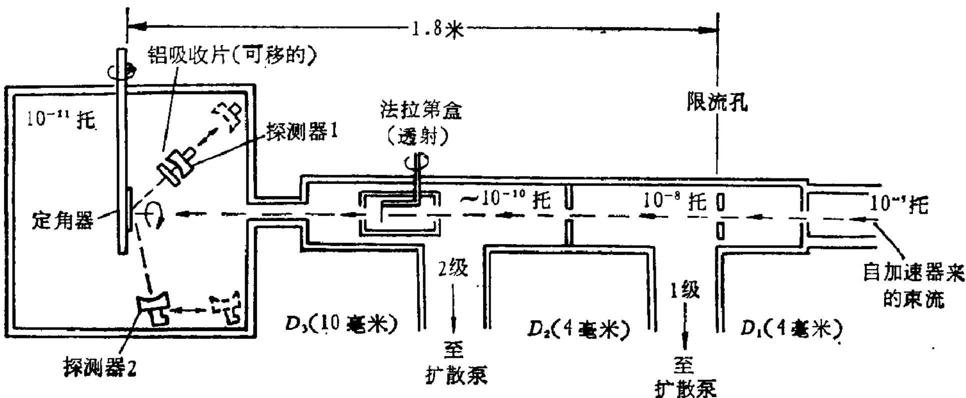


图 3.3-11 超高真空室（UHV）及其同加速器的梯度真空连接

(Torr)．从 D_1 到样品的距离约 2 米．另外，为了达到 1 毫米直径的准直束流，除了在加速器出口不远处有一个 1 毫米的准直孔外，还在抽气系统的第一级放上直径可调节的（1—3 毫米）的第二个小孔，保证束流分散角不大于 0.03°．这是在作沟道实验时用的．至于透射式法拉第盒是用作束流强度的检测．各部详细情况，以后分别在各章节中加以讨论．

四 散射束能量分析的电子学系统

由于背散射谱的深度分辨率正比于探测系统的能量分辨率，因此，系统应该有尽可能好的能量分辨率．元素组分的准确鉴定与谱的统计涨落有很大关系，故需要有一定的计数率，以便不需要很长的计数时间就能有合理的数据．用表面位垒探测器对散射束进行能量分析，鉴于背散射粒子的能量是散射角的函数，所以限制探测器的接收角是必要的．散射运动学因子 K 随散角的增加而减小，所以，通常选用的散射角愈大愈好．计数率应尽可能加大，探测器靠近样品会增加计数率，但同时也增大了接收角．近来人们采用环形探测器，中间有一小孔让束流通过打到靶上，这样以靠近 180°（175°）接收的背散射粒子．图 3.3-12 给出用于背散射和沟道实验的电子学装置框图．图 3.3-13 是正在进行这类实验测量

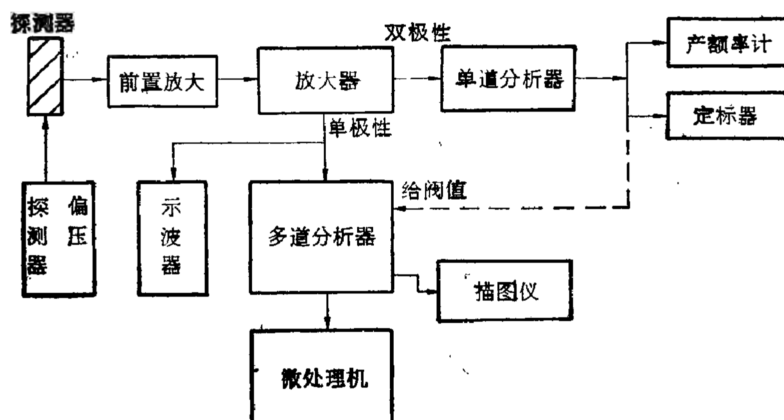


图 3.3-12 背散射和沟道实验的电子学装置框图

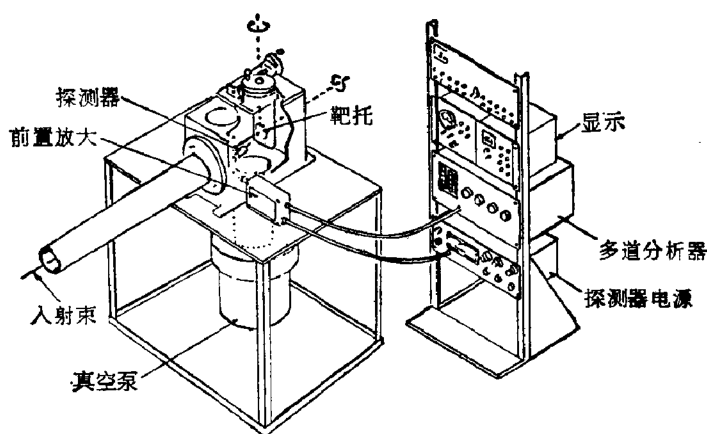


图 3.3-13　背散射实验靶室和电子学系统装置安排图

分析系统的布局图．其中各部件均是标准化的 NIM 系统，只有产额率计是专门为沟道实验设计的，它是利用粒子沿沟道方向的背散射产额同非沟道方向产额之比来确定晶体的方位，在一般的背散射实验中不用．

探测器的能量分辨率取决于入射离子在金垒的离散和探测器表面的氧化层，层厚度的均匀性，活性区形成正负电子对数目的统计涨落及其收集正负电子对的效率．其外，探测器系统分辨率还同它的电容、漏电流以及和前置放大器的输入场效应管之间的电容有关．因此选择探测器最好具有小的收集面积和大的耗尽深度．辐射损伤会使探测器分辨率变坏，当剂量达到 10^{11} ^{4}He/厘米时就完全不能用了．一般背散射实验所用的收集面积约 25毫米^2，而耗尽深度从 200 到 1000 微米．例如，PD-25-15-300 表明活性区为 25 毫米^2、分辨率是 15 千电子伏及耗尽深度为 300 微米．

电荷灵敏前置放大器用于得到最大的信号——噪声比．这与放大器的前级元件的选择关系极大，它与所选择的探测器特性有关．图 3.3-14 为半导体探测器的电荷灵敏前置放大器的偏压电路：(i) 交流耦合；(ii) 直流耦合．后者用于很高分辨率系统，前其则在高分辨率和高计数率之间取折中．

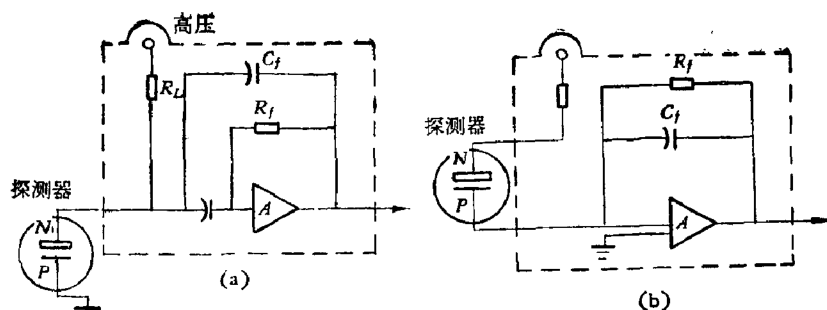


图 3.3-14　探测器和前置放大器耦合电路：(a)交流耦合，(b)直流耦合

一般放大器应有脉冲整形要求，因为：(i) 避免脉冲堆集；(ii) 增大信号——噪声比. 并具有两个输出：单极性输出和双极性输出，所提出的输出脉冲形状如图 3.3-15 所示.

多道分析器的功能是：数据获取. 贮存、显示和初步分析. 数据分析的模式有：脉冲高度分析 (PHA) 或多定标方式 (MCS). 背散射谱学主要采用脉冲高度分析. 多定标方式用于沟道测量.

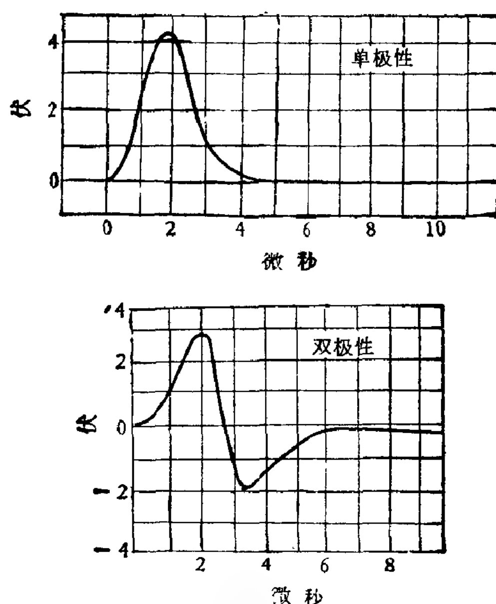


图 3.3-15　放大器两种极性输出脉冲

图 3.3-16 为多道分析器的框图. 在作振幅分析时，测量每个输入事件的幅度，把这个幅度转化为一个数，叫做“道址”或“道数”，而这个“道址”正比于脉冲高度，并把这事件作为一个计数贮存在单个道构成的记忆中，从而得到谱. 在一定时间内每道计数等于实验进行到该时刻的脉冲总数，其幅度相当于道址. 模-数转换(ADC)提供道址登录，相应道包含的计数数目可以从记忆中调出，放到数据登录中去，并在前面的值加上 1. 然后，把最新的计数放回到记忆. 所以，在 PHA 模式中，ADC 实际上使输入脉冲振幅数字化，使得记忆系统可以接收.

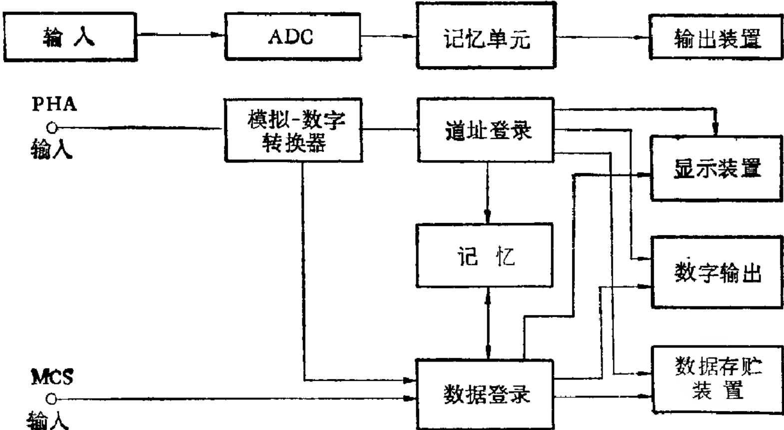


图 3.3-16 多道分析器框图

§ 3.4 低能离子散射

低能离子散射(一般在 0.5—10 千电子伏)可以获得材料表面结构和元素组分的信息，对固态表面最外层原子排列状况特别灵敏. 近年来，引起了人们极大的兴趣. 随着超高真空技术的发展(图 3.3-10)，低能离子散射谱学无疑将成为表面物理和表面化学的有力工具.

一 与"高能"(兆电子伏)离子散射的联系和区别

低能离子散射过程仍然被认为是两体碰撞[见图 3.1-1(c)]，可用散射运动学(3.1-2b)式描述．如果材料表面不只一种组分，则离子为第 i 种元素散射能量为

$$E_i=\left[\frac{M_1\cos\theta+\sqrt{M_i^2-M_1^2\sin^2\theta}}{M_1+M_i}\right]^2E_0 \qquad (3.4\text{-}1)$$

散射离子的能量 E_i 是由同离子碰撞的表面原子质量 M_i 决定的，其它记号同 [3.1-2(b)] 式相同．因此，散射离子能谱相当于表面原子的质量谱．如图 3.4-1 所示．质量分辨率随表面原子质量的增加而降低．采用较重的入射粒子 Ar^+、Kr^+ 和 Xe^+ 等，质量分辨率会大大改善．

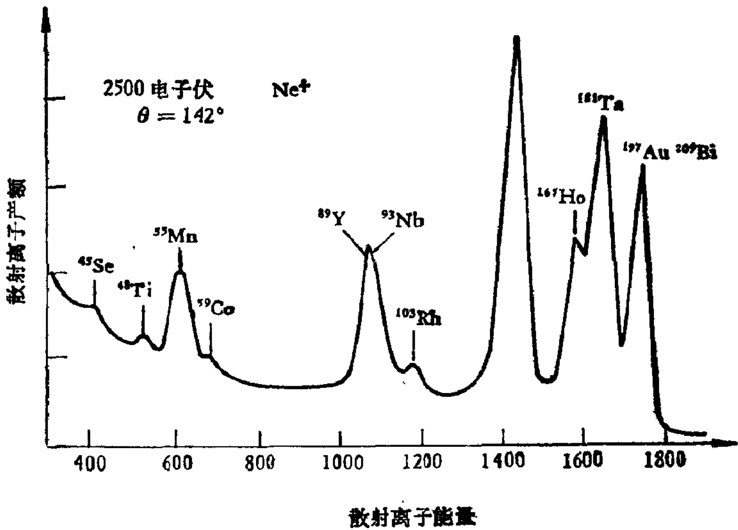


图 3.4-1 含有多种元素靶对 Ne^+ 离子的散射能谱

由于卢瑟福散射具有简单的库仑相互作用势，所以散射产额的定量解释比较简单，而低能下要考虑原子核周围电子屏蔽作用．

同"高能"离子散射实验相比，离子产生容易而便宜，甚至不用复杂结构的加速器，只要有离子源就可以了．但需要超高真空

($<10^{-9}$ 托)以防表面污染太重."高能"散射和低能散射之间的主要区别是分析技术.在"高能"下,硅表面位垒探测器和多道脉冲高度分析器对能量超过某一最小值(~20 千电子伏)的所有散射粒子进行垒计计数,既有离子也有中性粒子.低能散射的能量分析器是特制的圆筒形镜分析器(图 3.4-2),利用环形沟板式电子倍增器作为探测器[10].初离子束轴向通过系统,垂直入射到靶上,散射角固定为 142°.这种分析器实际是单道分析,即选择一定能量 E 和能量间隔 ΔE 内的粒子记录下来.散射产额显然要降低,但可用较大的束流而不会有脉冲"堆集"问题(束流可大到 1.8—2.5 微安/厘米^2).这在兆电子伏离子散射中经常遇到的问题.再者,这

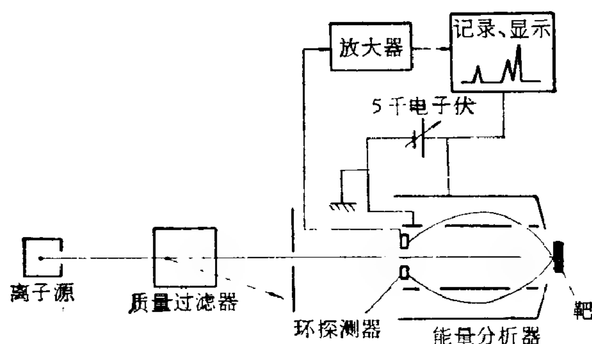


图 3.4-2 低能离子散射测量装置示意图[10]

种能量分析器只收集离子不收集中性粒子,而低能散射中有一大部分离子会变成中性子,于是,进一步减小了散射产额,却提高了低能散射对表面探测的灵敏度.图 3.4-3 是四种不同能量的 ^{4}He 离子在多晶金上的散射能谱,可以看出从一种散射向另一种散射的变化.当能量为 $E_0 = 25$ 千电子伏时,有很宽的本底,这是由于入射粒子除了背散射碰撞外,在向里路径和向外路径上都会有能量损失[见(3.1-14)式和(3.1-15)式]造成的,并且随着入射离子能量的减小而很快减弱,于是,很尖的表面峰就突出起来.谱中尖锐表面峰的形成是中性化效应的结果,因为穿透表面一两层原子的离子要比直接被表层原子散射离子的中性化几率大得多.

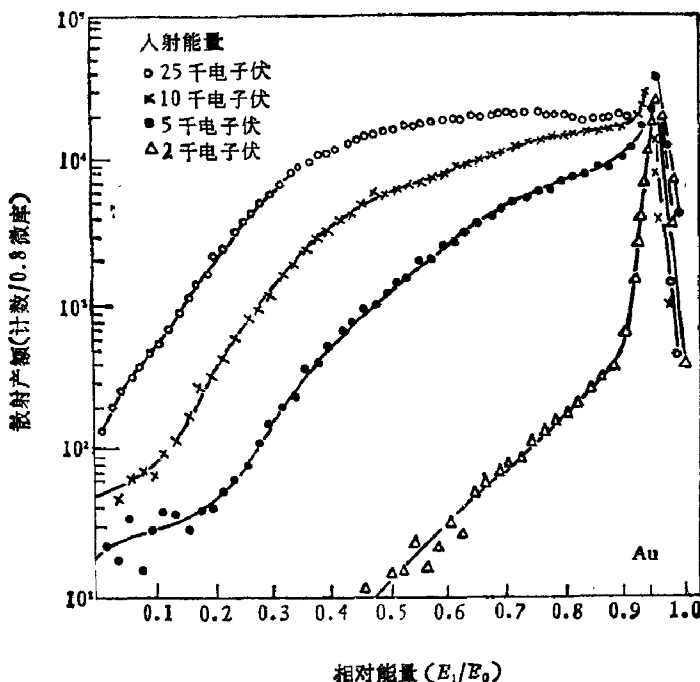


图 3.4-3 不同入射能量 ^{4}He 离子自多晶金上散射谱[11]

二 低能离子在固体表面中性化

如上所述，离子中性化在低能离子散射中是非常重要的现象，因为分析器所收集到的散射离子仅是总产额的一小部分．假定离子初束流强度 I_0，经靶表面元素 i 散射后的离子强度 I_i 为

$$I_i = I_0 \Delta \Omega N_i \delta x_i T \left(\frac{d\sigma_i}{d\Omega}\right) P_i^+ \qquad (3.4\text{-}2)$$

其中 $\Delta\Omega$ 为立体角，T 为系统透射因子，N_i 是第 i 种组分的浓度(原子/厘米^2)，$(d\sigma_i/d\Omega)$ 微分散射截面(厘米^{2}球面度$^{-1}$)及 P_i^+ 是离子束中性化几率，由 $P_i^+ = Y_i^+/Y_i$ 表示，其中 Y_i^+ 是散射离子的产额，Y_i 是为 i 类元素散射的总产额(包括离子和中性粒子) δx_i 为取样深度，表示散射离子形成"表面峰"那一层的假想厚度．如果灵敏度可达到单层(常常能做到)，δx_i 的数量级就是原子间距．

实验条件不变时可测出或算出 $C = I_0 \Delta \Omega T$ 来，方程(3.4-2)变成

$$I_i = CN_i \delta x_i \left(\frac{d\sigma_i}{d\Omega}\right) P_i^+ \tag{3.4-3}$$

例如，为了确定上式中后面四个因素的影响，把^{69}Ga和^{75}As分别注入硅、氧化硅、氮化硅、钽和氧化钽中。注入 Si、SiO_2 和 Si_3N_4 的能量是 80 千电子伏，注入 Ta 和 Ta_2O_5 的能量是 240 千电子伏，每个样品的注入剂量是 10^{16} 厘米$^{-2}$. (3.4-3)式对整个深度 Δx 取和

$$\sum I_i \Delta x = C\delta x_i (d\sigma_i / d\Omega) P_i^+ \sum N_i \Delta x \tag{3.4-4}$$

所以

$$\left(\frac{d\sigma_i}{d\Omega}\right) P_i^+ = \frac{\sum I_i \Delta x}{C\delta x_i D} \tag{3.4-4a}$$

式中 $D = \sum N_i \Delta x$ 为注入剂量。由于注入剂量和能量高，注入区域可看成是非晶层，荫蔽效应很低，低能探针束 2.5 千电子伏 Ne^+ 自第二原子层得到的 P_i^+ 值接近于零。因此，用平均原子距离 $N^{-1/3}$ 代表本体到表面的因子 δx_i，N 是单位体积的原子总数。所得到的 $(d\sigma_i/d\Omega)P_i^+$ 值列于表 3.4-1，表 3.4-1 清楚地表明P_i^+值与发生碰撞的原子特性有关，并且依赖其化学环境，因为 $(d\sigma_{As}/d\Omega)$和$(d\sigma_{Ga}/d\Omega)$ 之间变化最大的只有 15%.

表 3.4-1 $(d\sigma_i/d\Omega)P_i^+$ 的值

注入离子 \ 衬底材料	Si	SiO_2	Si_3N_4	Ta	Ta_2O_5	GaAs
^{69}Ga	2.74	1.80	1.87	0.22	0.61	1.00
^{75}As	4.38	1.41	3.30	0.59	1.98	1.61
$^{75}As/^{69}Ga$	1.60	0.77	1.76	2.70	3.26	1.61

散射离子产额 Y_i^+既同散射过程本身有关，又与中性化几率有关。但是，至今对固体内外的中性化过程的细节还未建立起来。艾雷克逊 (Erickson) 和西米斯 (Smith)[12] 等人发现，用低能^4He离

子打到某些物质靶上，如 Ga、Ge、In、Sn、Sb、Pb 和 Bi，散射离子产额随入射粒子能量发生振荡．当^{4}He 离子入射到 Pb 和 Bi 上时，振荡很厉害，图 3.4-4 示出 $^4He^+$ 对 Pb 的散射，是从两种不同散射角得到的．散射离子产额随入射粒子能量的振荡变化被认为是离

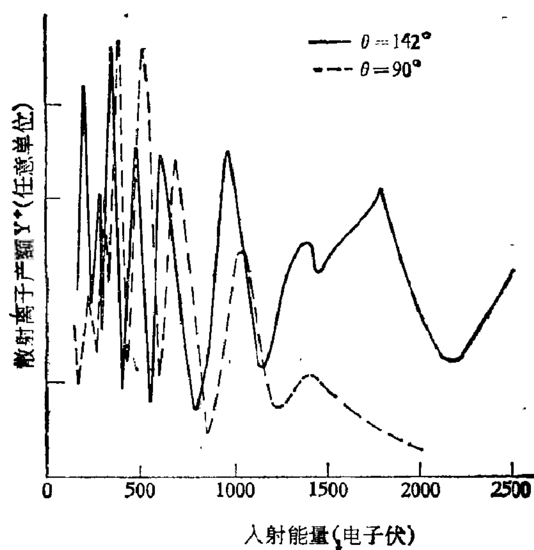


图 3.4-4 $^4He^+$ 入射到 Pb 靶上，散射离子产额同入射粒子能量之间的关系，呈现强烈振荡。其中虚线是 $\theta = 90°$ 测量[12]，实线是 $\theta = 142°$ 测得的[13]

子中性化几率的振荡．这种现象很早以前就在研究气体碰撞中发现了[14]．它起因于离子和靶原子之间发生共振电荷转移，即当离子和靶表面原子接近时，电子在接近两者之间交叉能级跃迁波函数的相干涉从而形成一个准分子引起的．而靶原子的化学环境会影响原子的电子能级，因此，谱的共振特性可提供表面的化学信息．

然而，通过俄歇过程（§ 2.7 和第四章）和共振隧道过程使离子中性化（也叫"正常"中性化过程），散射离子产额都不会有振荡，如图 3.4-5 所示．在入射角和散射角一定时，单元素靶的散射离子分数

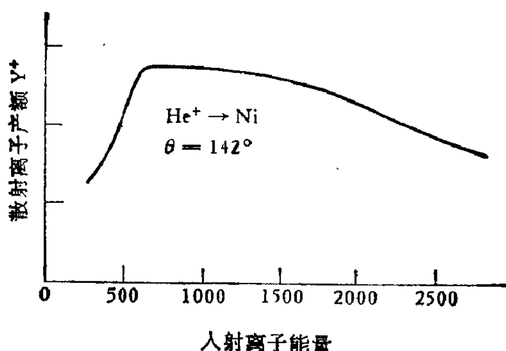


图 3.4-5 散射离子产额同入射粒子能量的关系 ($He^+ \longrightarrow Ni$)

$$P^+ = \exp(-a/v) \tag{3.4-5}$$

a 为中性化常数，v 是散射离子速度．因此，$\ln P^+$ 与 v^{-1}有线性关系．由于散射离子电流正比 σ^+，ln（信号/σ）也应随 v^{-1} 线性减小．散射截面可从费米-狄喇克（Dirac）相互作用势的近似表达式摩利尔（Moliere）势[15]（见第十章）计算出来，如图 3.4-6 是微分散射截面同入射粒子能量的关系．如果把(信号/σ)用对数坐标绘出同 v^{-1} 的关系，的确是线性的(图 3.4-7)．它表明散射离子部分随 v^{-1} 指数减少，并且可用 σ 的能量关系来确定 P^+.

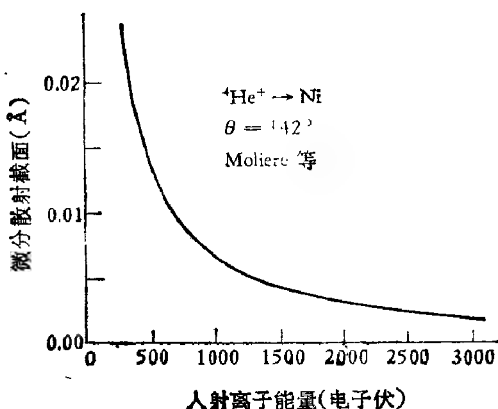


图 3.4-6 用摩利尔相互作用势计算 $He^+ \rightarrow Ni$ 散射截面 σ 同入射能量的关系[15]

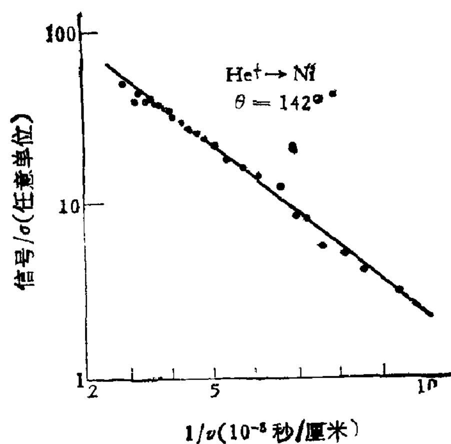


图 3.4-7 在对数坐标上，$He^+ \to Ni$ 散射离子电流信号与散射截面 σ 之比同 v^{-1} 的线性关系[14]

三 组分分析

在定量分析中，上述中性化效率和散射截面的问题，有必要用

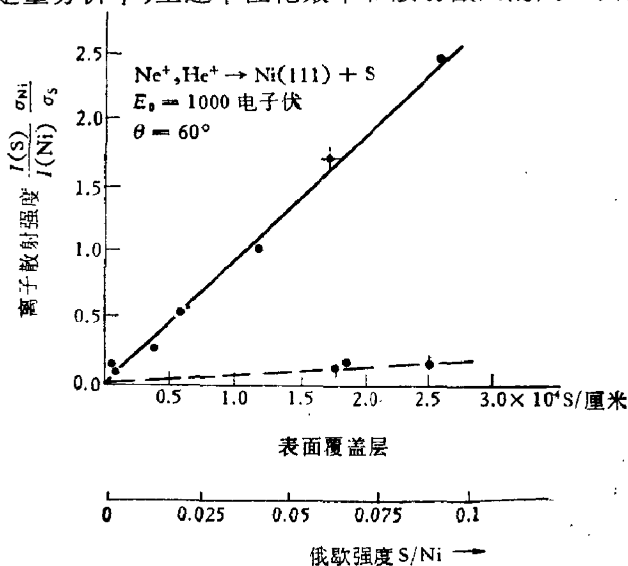


图 3.4-8 相对离子散射强度 $(I_S/I_{Ni})\sigma_{Ni}/\sigma_S$ 同镍上复盖硫厚度关系. 硫的复盖层是由俄歇电子谱 (AES) 确定的[27]

标准样品进行刻度并同其它方法进行比较．特别是散射产额同靶原子密度的关系，最好是线性关系，但在探测深度很浅时这并非必要．一个办法是测量自沉积在硅片上金膜的散射产额（用 He 和 Ar 离子），而其密度已为中子活化法确定了．如果在镍上吸附着硫和氧，散射强度同表面覆盖层厚度有线性关系[16]，如图 3.4-8，其中 S/Ni 比率是由俄歇方法得到的，而俄歇测量又由放射性微量实验刻度[17]．这种线性关系表明在这个范围内中性化效率同覆盖层厚度无关．在镍上的氧和硫探测极限是 10^{-3}到 10^{-4}单原子层．

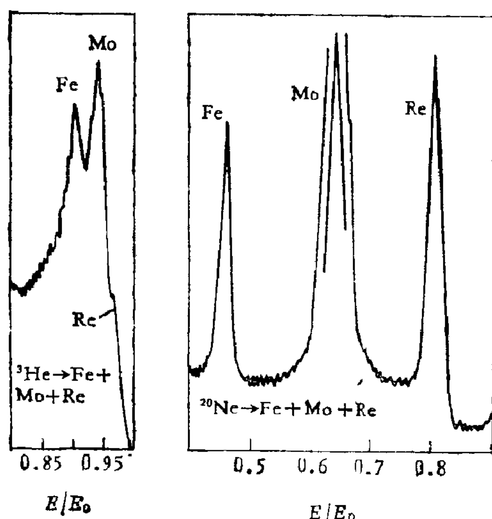


图 3.4-9 $^3He^+$ 和 $^{20}Ne^+$ 自 Fe-Mo-Re 合金的背散射．入射能量是 1.5 千电子伏[18]

图 3.4-9 是$^3He^+$和$^{20}Ne^+$两种离子分析热扎合金 Fe-Mo-Re 表面，可以看出用较重的离子对质量分辨率有较大的改善．在 $^3He^+$ 谱中，Fe 和 Mo 的峰能分开，但 Re 的位置只有一个不明显的肩膀．而在 $^{20}Ne^+$ 入射情况下，三个峰都能很好地分开，并且低能端的本底也很小． 对于较轻的元素如 ^{12}C 和 ^9Be，$^{20}Ne^+$ 不能用于 90° 的散射，不过此时用 ^4He 束已足够了．

用 1 千电子伏 Ne 离子散射研究热离子阴极的激活过程．这种钨“配剂”型阴极是由 Al_2O_3、BaO 和 CaO 等混合物浸渍到多孔

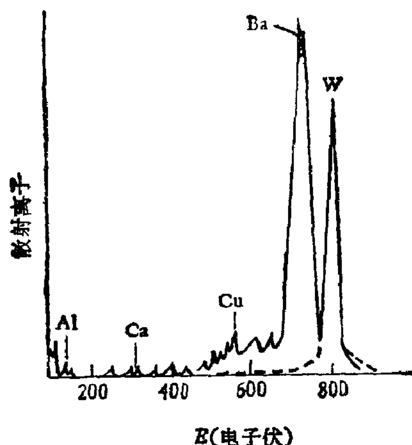


图 3.4-10 $^{20}Ne^{+}$ 离子自 Ba 掺至钨阴极上散射的能谱[19]
虚线- - -是激活前； 实线——在 1165℃ 下激活阴极

钨上制成. $^{20}Ne^{+}$ 离子散射能谱示于图 3.4-10. 室温下(虚线)主要是钨峰,其它很小. 但加热到 1165℃ 激活并停在 1165℃, 谱上呈现 Ba 峰大于 W 峰,还有一些小的 Cu、Ca 和 Al 峰. 钡移到表面

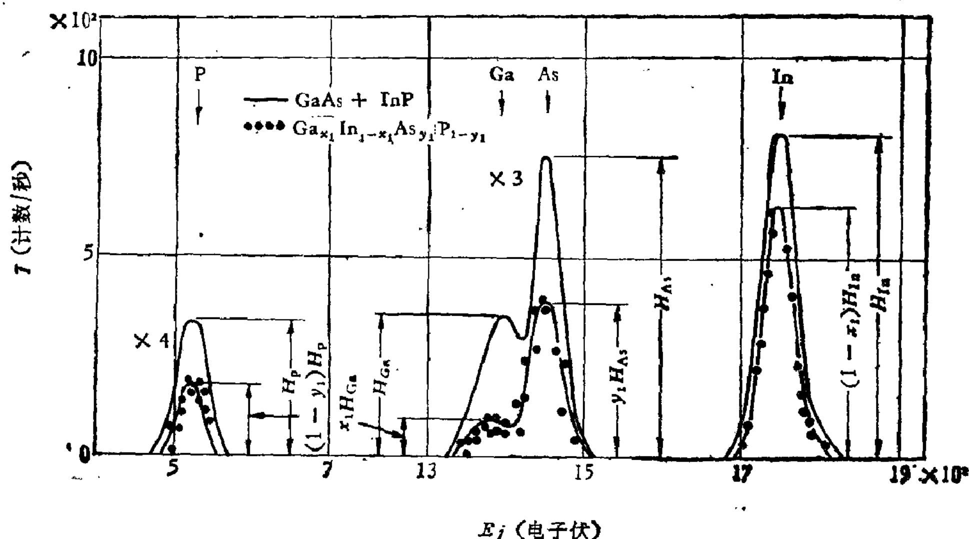


图 3.4-11 定量分析 $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ 化合物：低能离子散射谱同 GaAs 和 InP 的标准谱比较[21]

使电子发射增加，铜是杂质. 钨峰比原来小 ～20%，这是由散射 Ne^+ 离子在热阴极周围电子鞘中的中性化造成的.

此外，在分析钝化铁-铬不锈钢的表面腐蚀，电镀金属的氧化以及 III-V 络合物中元素的深度剖析，都是极有用的. 例如，图 3.4-11 是液相外延生长层[20] $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ 的低能离子散射能谱同作为标准的 GaAs 和 InP 的谱相比较[21]. 通过简单的比例关系，就可以确定其组分为 $Ga_{0.17}In_{0.83}As_{0.33}P_{0.67}$. 另外，还可对组分作深度分析，如多相结构激光晶体的 GaAlAs，它是在低压有机金属中气相外延生长得到的[22]. 图 3.4-12 示出 $Ga_{0.69}Al_{0.31}$ As/GaAs/$Ga_{0.69}$ $Al_{0.31}$ As 多相结构中铝的分布，表明 GaAlAs/GaAs 和 GaAs/GaAlAs 的界面分得很清楚，其宽度(从 12—88%)分别是 6.6 和 7.8 毫微米，属于实验深度分辨率. 测量铝的百分比为 33 ±1%，跟预计值 31% 差不多.

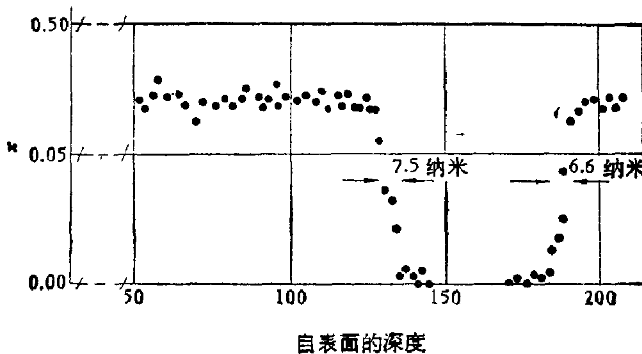


图 3.4-12 铝的深度剖析，用低能离子散射分析 $Ga_{1-x}Al_xAs$ 的多相结构[21]

低能离子散射适用于定量分析表面组分以及很浅界面的剖面. 一般来说，离子中性化几率与碰撞的原子和其化学环境有关. 在低原子量时中性化与浓度无关. 但是，无论哪种情况，要定量分析均要使用类似组分的标准样品. III-V 络合物或合金的中性化因子与原子量和排列均无关系. 因此，记录知道组分的 III-V 样品中给定元素的离子散射谱峰高度，就可以刻度曲线，从而对任何

这类样品中的Ⅲ或Ⅴ族元素进行定量分析.

四 表面结构

低能离子散射（LEISS）研究固体表面结构始于对非中心对称晶体，如硫化锌和硫化镉极性面的绝对鉴定. 理论预言，[23]当1千电子伏 Ne^+ 对硫化锌(111)面散射时只有锌的峰，而对 $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$面只有硫的峰. 图3.4-13完全证实了这一点. 当散射角 $\theta=45°$ 时，除了沿极性晶体 ZnS(111) 面散射是锌的尖峰和沿$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$面硫的尖峰外，每个面还有相应于双散射的小峰，即 Zn-Zn 和 S-S 峰. 单尖峰的位置依赖于离子的路径，它是由离子-原子相互作用势和最近邻原子的相对位置决定的；而双散射和多次散射则是由相继两体碰撞及有关势、表面几何形状和晶格缺陷确定的.

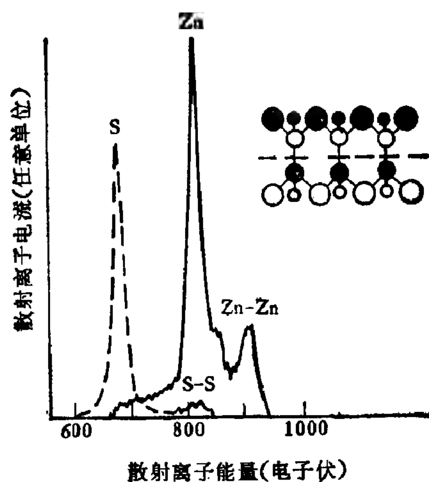


图3.4-13 离子电流和散射 Ne^+ 能量的关系.[23] $\theta=45°$ 沿 ZnS (111) 方面入射是锌峰，而沿 ZnS$(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$ 方向则是硫峰

当然，要准确地获得表面结构的信息，还是取决于低能离子散射对表面的灵敏度，即鉴别表面上一个原子对另一个原子荫蔽效

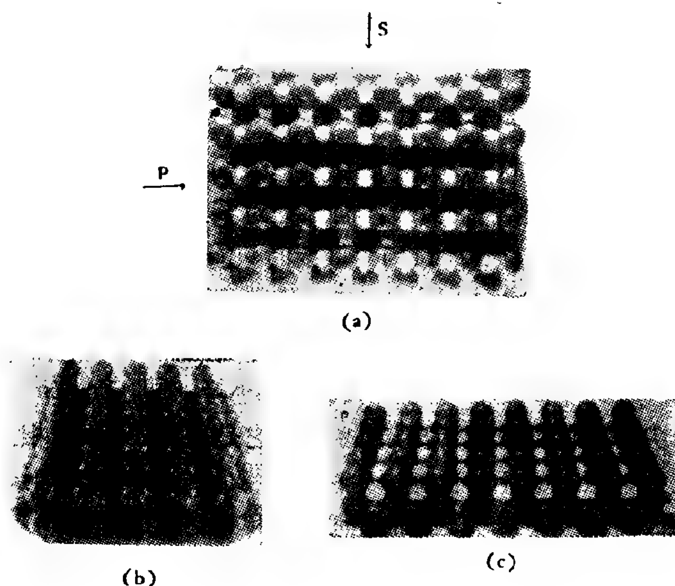


图 3.4-14 晶体表面两个不同方位荫蔽效应示意图. (a) 直观(b) 以同垂直方向成 60° 角的"P"方向观察 (c) 以同垂直方向成 60° 角的"S"方向观察

应的能力. 可使晶体转动或改变入射角使离子能看到不同排的原子. 图 3.4-14 就是从两个不同方位观察晶体表面原子之间荫蔽效应示意图. 原子是用硬球模型表示的. 艾立斯 (Ellis) 和泰勒 (Taylor) 用 500 电子伏 He^+ 的低能离子散射结合低能电子衍射 (LEED) 研究 $UO_2(111)$ 面上的氧. 根据硬球模型, $UO_2(111)$ 面最外层是氧层,如图 3.4-15(a)、(b) 所示. 当 He^+ 入射角为 0 时氦离子穿过最外表的氧层,所得到的信号包括 He^+ 自铀和氧两种原子散射的结果. 当入射角改变,达到临界角 θ_c,入射束受到氧原子阻挡而碰不到铀原子,此时只有氧的峰. 从图 3.4-15(b)可看出,存在左右两个阻挡角. 实际上,考虑到氦离子和氧原子的排斥势,硬球模型显然要加以修正. 图 3.4-15(c) 就是所形成的影锥. 图 3.4-16 是测得自铀原子上散射信号随入射角的变化. 在 $\theta_c=$ 57° 和 77° 处观察到两个截止角 (cut-off), 分别在 3° 和 9° 内, 可从影锥模型计算得到,并与图 3.4-15(a)的氧为束缚中心的模型

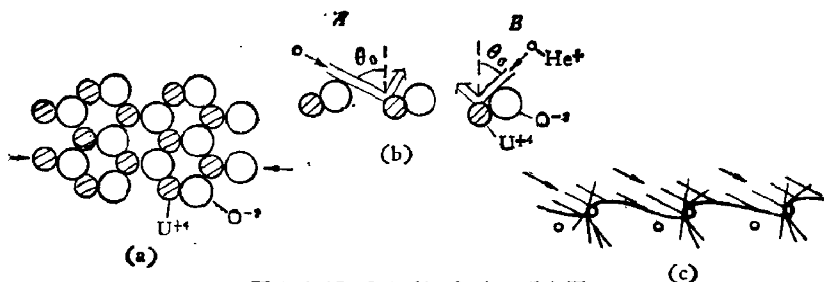


图 3.4-15 $UO_2(111)$ 表面示意图.
(a) 直视，(b) 两种阻挡角，(c) 影锥形成[24]

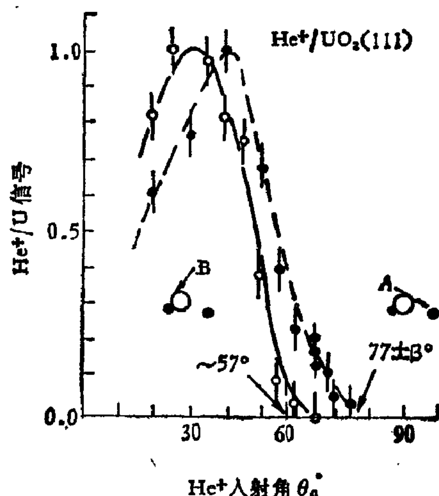


图 3.4-16 铀信号同入射角的关系[24]曲线 A 是离子从左边进入的，曲线 B 是离子从右边进入的 [见图 3.4-15(b)]

相符合.

表面原子的化学环境对低能离子散射谱有相当的影响. 比较 α-和 γ-Fe_2O_3 的谱(图 3.4-17)，可以看出有相当大的不同. 图 3.4-17 中两个曲线是在入射 He^+ 剂量完全相同的情况下得到的. 如果表面去掉几个原子层，则两者差别就很小. 图中 α-Fe_2O_3 谱的本底比 γ-Fe_2O_3 的低. 如果 He^+ 入射束剂量很小，γ-Fe_2O_3 的铁峰几乎看不见. 然而，在 α-Fe_2O_3 中，即使剂量很低，1650 电子伏处的 Fe 峰也很显著，表明 He^+ 可被铁原子直接散射. 在 γ-Fe_2O_3 中，铁原子直接散射受到很强的干扰. 看来铁原子虽不处在最外

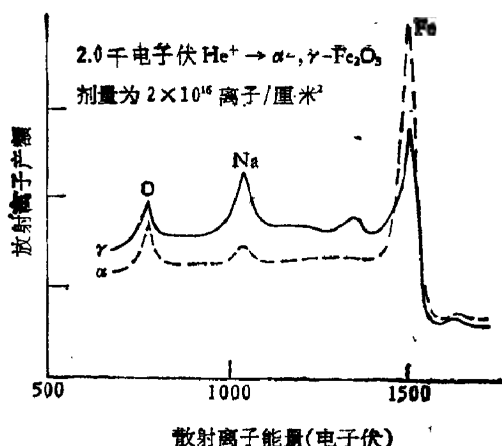


图 3.4-17　α-和 γ-Fe_2O_3 对 2000 电子伏 He^+ 散射能谱的比较[25]

层上，但却非常接近于最外表层，故本底大为增强. 有一种模型认为最上层可能附着氧和氢. 这样，仅管 α-Fe_2O_3 和 γ-Fe_2O_3 的本体组分相同，但化学效应却对谱影响很大.

五　聚合物表面的研究

用现代表面分析手段来研究聚合物表面情况还处于初期阶段，把低能离子散射谱学用到聚合物的研究上则更是刚刚开始[26]. 但已显示出强大的生命力. 例如确定表面无机杂质的存在，测量含氧聚合物的氧-碳比，证明了在含氧聚合物表面有碳的富集. 通过自碳和氧散射强度同入射离子能量关系的测量，表明 $^4He^+$ 自碳原子散射有较大的中性化几率.

(1) 聚合物上低能离子散射谱的特征和实验要求

同前面相比，聚合物上低能离子散射谱的低能端有一个很宽的强峰，如图 3.4-18. 产生强低能峰的原因，可能是由于 $^4He^+$ 离子在较深处硬撞时溅射出 H^+ 离子，也可能是氦经多次碰撞后背散射到表面时再电离造成的. 从实际出发，由于碳的散射峰会叠

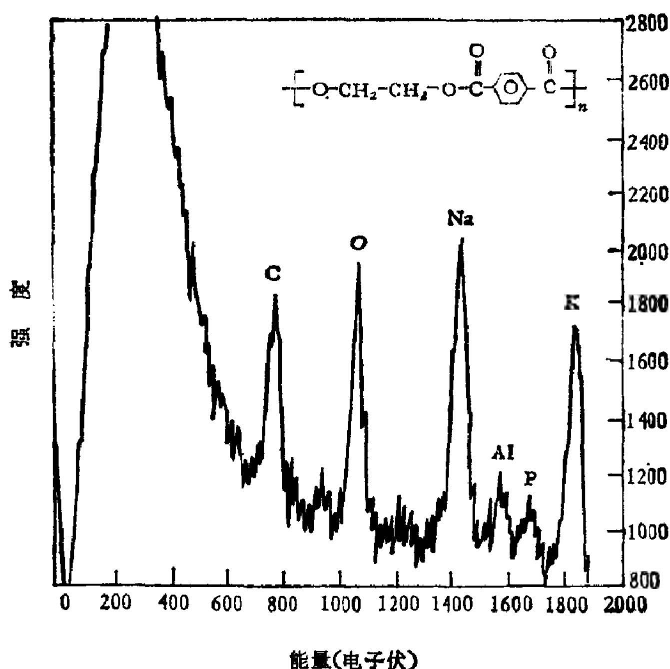


图 3.4-18　2750 电子伏 He^+ 在聚脂树脂 (Mylar) 上的散射能谱[27]

加到强低能峰的尾部会对谱产生干扰．为了减少这种影响，实验时常在电子倍增器上加一成形电压来记录散射谱，即在图 3.4-2 所示的圆柱镜分析器（CMA）道板前表面加上几千伏负电位（相对于 CMA 出口缝），并用分析场扫描，使得透过 CMA 的离子在不变高能处打到它．从倍增器阴极发射的二次电子几乎全是势电子发射，动能发射的贡献很小．因此，可使测得的低能峰减弱好几倍，从而有利于碳散射信号的测量．而且，这样做并不影响其它元素散射峰的相对和绝对强度．

由于聚合物一般是绝缘体，实验上还要用装在靠近 CMA 前锥样品架上的发型钨丝来部分地补偿样品表面的荷电．聚合物样品是把一个钻孔的钨板装在灯丝和样品之间以减少光和热的直接

辐射. 调节灯丝发射电流使样品上平板电流探测器测量的初级离子电流为量值上相等的发射电子所补偿. 这种预调节便于快速测量聚合物散射谱,并使荷电稳定在 +30—+40 伏, 这种荷电水平不会使峰加宽多少, 表明至少在表面测量范围内荷电是均匀的且不随时间变化. 若补偿不完全,则散射离子的能量相对于(3.4-1)式所预言的值有一个位移. 应该指出, 用图 3.4-2 装置进行低能离子散射测量时能量位移的产生有许多因素. 例如, 初离子束的减速,样品表面和圆柱镜分析器 (CMA) 之间散射离子的加速以及散射离子在样品和 CMA 入口缝之间电场的偏转,致使(3.4-1)式的质量-能量线性关系受到破坏,也会造成谱峰位移. 但在一般情况下,这种位移不会影响组分的确定.

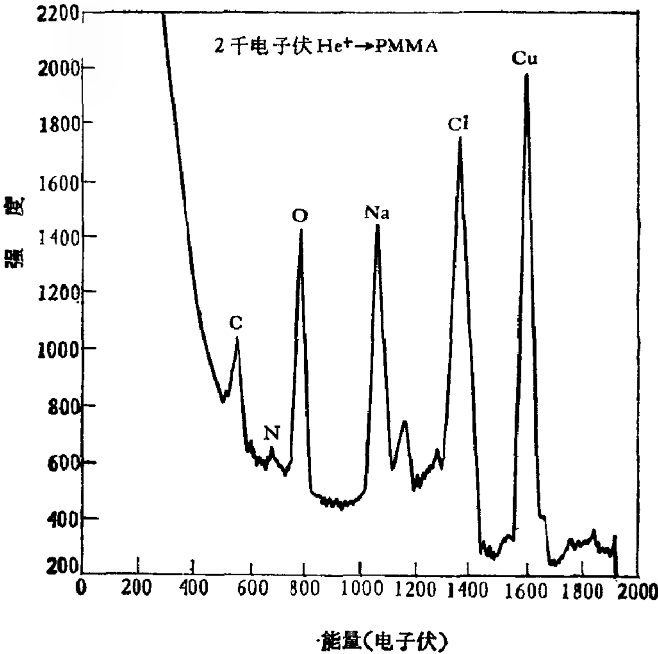


图 3.4-19 2000 电子伏 He^+ 对污染 PMMA 样品的低能离子散射谱

(2) 表面杂质和污染

图 3.4-19 是 2 千电子伏氦离子对于污染了的 PMMA ($[C_5H_8O_2]_n$)的散射能谱,说明低能离子散射对表面污染的探测能力. 有些聚合物含有无机或有机金属稳定剂、润滑剂或塑化剂等,它们有表面分离效应,如图 3.4-20 所示的聚氯乙烯 (PVC) 含有稳定剂锡的 He^+ 离子散射能谱. 而且,一旦聚合物表面有无机物的污染,便不容易采用 $^4He^+$ 和 Ne^+ 的溅射方法除去*). 相反,在溅射处理时本体污染会在退缩的表面上聚集,从而使污染物峰的强度增加. 何况,实验时还有样品交叉污染,特别是在研究聚氯

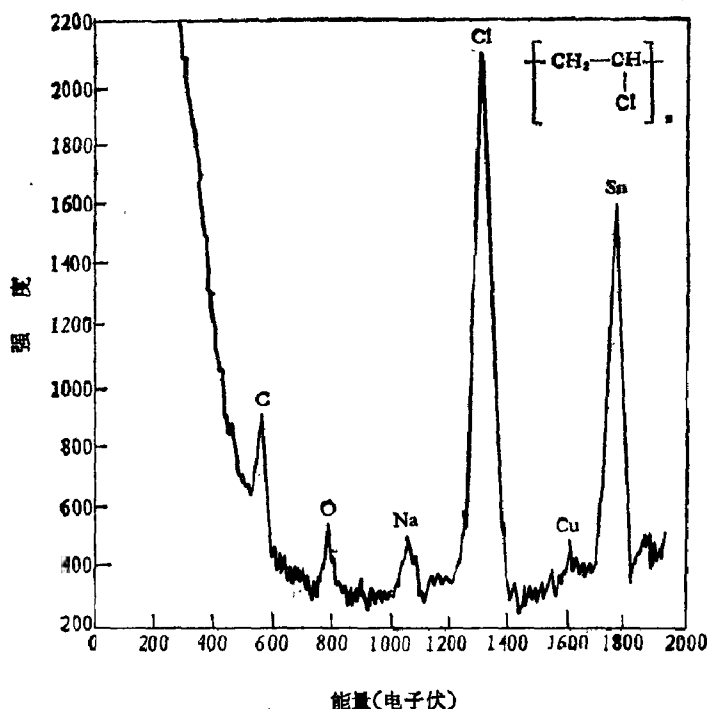


图 3.4-20 含稳定剂锡的聚氯乙烯(PVC) LEIS 谱(2000 电子伏 He^+)

*) 关于溅射现象将在第四章中讨论.

乙烯（PVC），聚合物样品残碴就会有 Cl、Cu 和W等污染物．这会给实验结果的分析带来不便，因此，要注意样品清洁和替换样品时的清理．

(3) 碳氧比

由散射运动学因子[即(3.4-1)式和 § 3.1]讨论可知，当散射角 $\theta > 90°$ 时，不能探测到物质中的氢．所以，低能离子散射确定聚合物中的氧-碳比就成了主要目标．图 3.4-21 和 3.4-22 分别是 2.75 千电子伏 He^+ 对聚甲基丙烯酸甲酯（PMMA-218）和（PBDDA）的散射谱．PMMA-218($C_5H_8O_2$)和 PBDDA($C_{10}H_{14}O_4$)化学材料相似，两者结构单元中的氧-碳比率相同 [$(O:C)_{PMMA} = 2:5$，$(O:C)_{PBDDA} = 4:10$]，图中也反映两者 O:C 强度比相当．

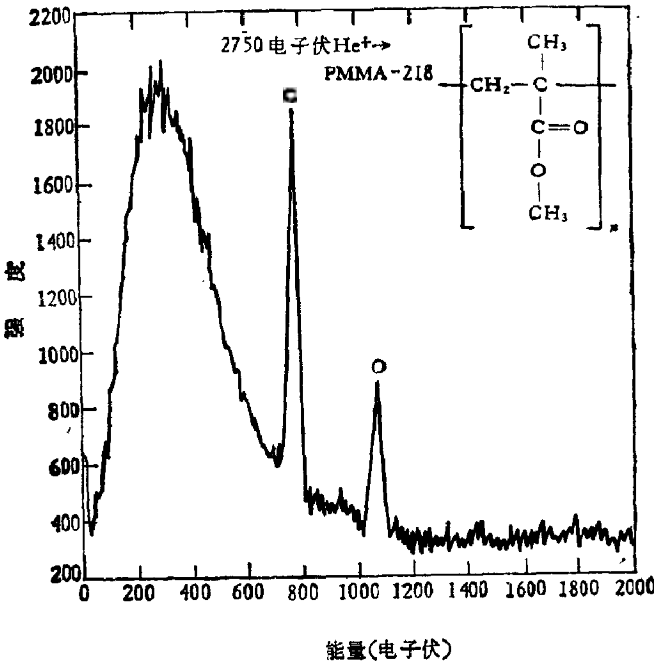


图 3.4-21　2.75 千电子伏 He^+ 对（PMMA-218）散射能谱

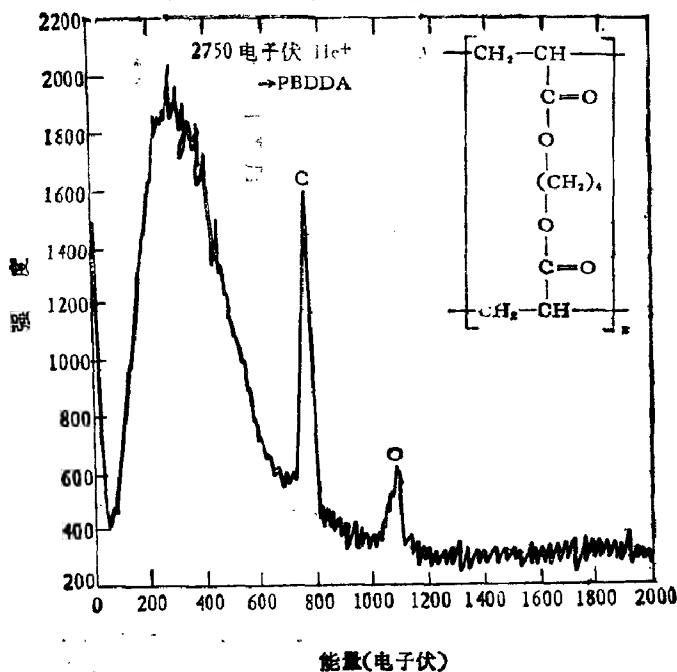


图 3.4-22　2750电子伏 He^{+} 对 (PBDDA) 散射能谱

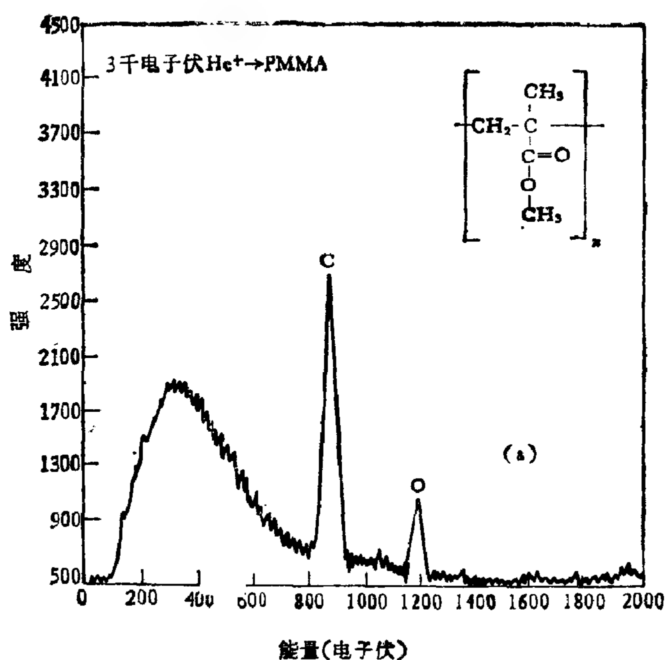
表 3.4-2　含 C、H 和 O 的聚合物 O:C 的研究[27]

聚合物		结构单元	本体 O:C*)	测量 O:C**)	修正值
聚碳酸酯	PC	$C_{16}H_{14}O_3$	0.19	1.9	0.10
聚酰亚胺	PI	$C_{22}H_{10}O_5N_2$	0.23	0.75	0.04
聚甲基丙烯酸甲酯	PMMA-218	$C_5H_8O_2$	0.4	0.34	0.02
聚甲基丙烯酸甲酯	PMMA-XT	$C_5H_8O_2$	0.4	0.27	0.01
	PBDDA	$C_{10}H_{14}O_4$	0.4	0.32	0.02
聚对苯二甲酸乙二酯	PET	$C_{10}H_8O_4$	0.4	1.1	0.06
聚乙烯醇	PVA	C_2H_4O	0.5	0.77	0.04
聚甲醛	PoM	CH_2O	1.0	2.8	0.15

*) 由结构单元公式推出的理论值.

**) 低能离子(2750 电子伏 He^{+})散射峰面积得到的 O:C 值.

因此，起初认为化学剂量比和测量强度比之间有直接关系. 但是，大多数含有碳、氢和氧的聚合物样品均不呈现这种直观的比例关



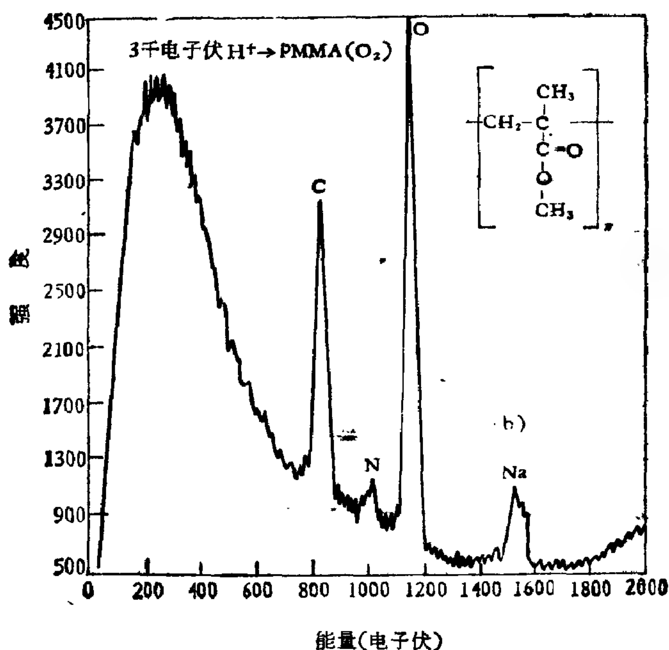


图 3.4-23　低能离子(3 千电子伏 He^{+})对挤压式聚甲基丙烯酸甲酯(PMMA)散射谱:
a) 未氧吸附,　b) 测量后散射室充以 2×10^{-6} 托的氧气

系. 表 3.4-2 列出几种聚合物结构单元公式获得的本体氧-碳比和测量峰面积推出的比率 O:C. 聚对苯二甲酸乙二酯 (PET). 聚碳酸酯 (PC) 和聚乙烯醇 (PVA) 的 O:C 测量值远大于本体 O:C 值,接近于 1;而聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA-218) 和 PBDDA 的 O:C 测量值比本体值小,接近于 0.3(本体 O:C 值为 0.4).

值得注意的是,在低能离子散射谱的测量中,各种聚合物样品散射能谱的碳峰强度变化不大而氧峰强度却有数量级之差. 例如,对聚甲基丙烯酸甲酯 (PMMA) 样品进行氧吸附的实地 (in-situ) 研究,而把氧气不断地充入散射室使其压力达到 2×10^{-6}托,离子束和中性化灯丝在气体中得到充分激发, 使得聚合物样品表面发生激活性化学吸附. 并测出吸附前后的低能离子散射谱, 示于图 3.4-23. 由图看出,即使在氧的散射峰(图 3.4-23b) 很强时, 碳峰强度没有显著变化.

要进一步研究这个问题, 必须对碳和氧的散射强度分别进行

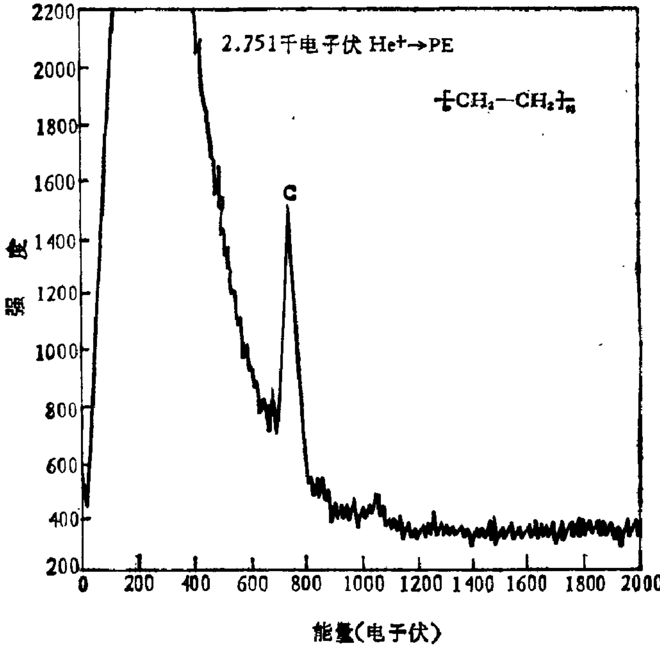


图 3.4-24 与图 3.4-21 和 22 条件完全相同情况下得到聚乙烯低能离子散射谱

刻度．对于碳的标定是采用聚乙烯（PE），见图 3.4-24．聚乙烯中只含碳和氢而没有其它元素．仅管如此，聚乙烯中碳的散射强度并不比其它含有碳、氢和氧的聚合物中碳的散射强度大．关于氧的标定是用 B_2O_3 玻璃样品所得到的谱(图 3.4-25) 进行的．选择 B_2O_3 是因为其中 B^{3+} 的离子半径很小 (0.2 Å)[28]，故这种玻璃表面可看成基本上是氧离子层．同硅玻璃及化学吸附金属 (Mg、Ti 等)中的氧散射信号相比，B_2O_3 散射谱的氧信号远比它们大．而且，B_2O_3 的氧信号也大大超过聚合物样品中氧信号强度．如果把纯碳(可用蒸发碳层) 得到的散射峰和 B_2O_3 得到的氧信号加以比较，作为表面原子的绝对密度，氧-碳比率为 18.1，这就是 2.75 千电子伏 He^+ 离子对氧和碳散射的相对灵敏度(当然与装置也有关)，它表明对氧的灵敏度远高于碳．这是很有意义的．从方程 (3.4-2)来看，氧和碳对 He^+ 中性化几率 (P_i^+) 可能对灵敏度比率

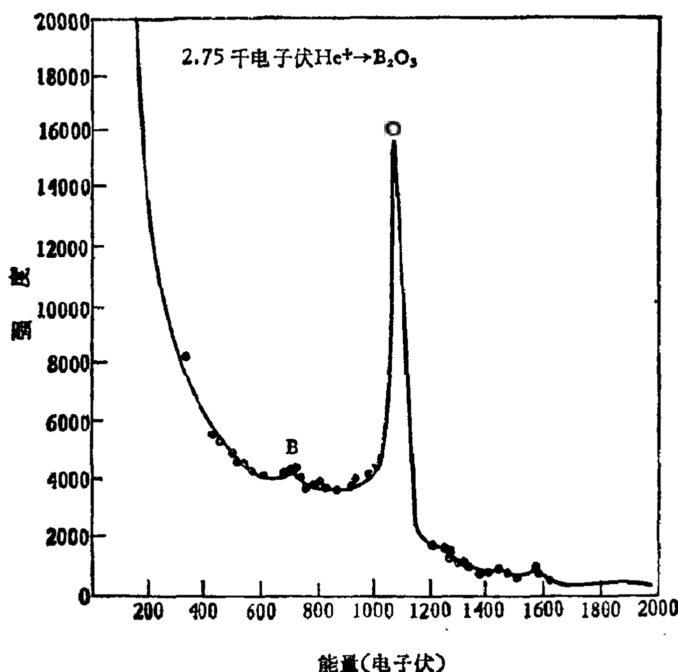


图 3.4-25　2.75 千电子伏 He^+ 对 B_2O_3 玻璃的散射能谱

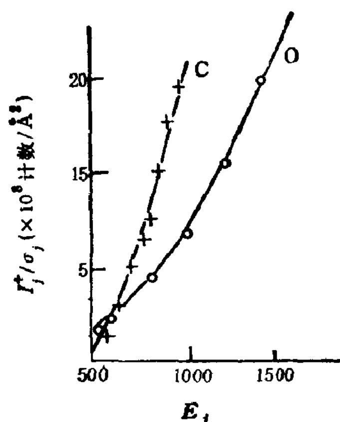


图 3.4-26 自碳和氧上低能离子散射信号同能量的关系

大小和能量关系起着重要作用。图 3.4-26 绘出 $I_O^+/\sigma_O(E_1)$(圆圈○表示)和 $I_C^+/\sigma_C(E_1)$ (十字形表示)同散射离子能量 E 的关系，碳上升很快，表明碳对 He^+ 散射比氧产生较高的中性化几率。

§ 3.5 中能离子散射

前面已经分别讨论了"高"能(RBS)离子散射谱和低能离子散射(LEIS)谱及其应用. 由图 3.1-1 可知，中能离子散射(MEIS) 介于上述两者之间，是由多次碰撞产生的，弹性能量损失和非弹性能量损失数量级相当(第二章 § 2.4)，加上大量离子在接近表面分析的区域停止下来和碰撞级联引起的辐射损伤，致使中能离子散射在进行定量分析和解释某些实验结果时较为复杂和困难.

应该指出的是，单用入射离子的能量来区分不同的散射区域(图 3.1-1)是不适当的. 例如，80 千电子伏 Ar^+ 离子的背散射谱就是典型中能离子散射谱，而 50 千电子伏质子的背散射则遵从卢瑟福散射截面. 因此，比较合适的方法还是采用林哈德约化能量 ε_L [(2.2-14)式]来区分. 于是，图 3.1-1 中所示的三种不同能区背散射分别为：$\varepsilon_L \leqslant 0.3$ (低能)，$\varepsilon_L = 0.5—10$ (中能) $\varepsilon_L > 20$

(“高”能). 由于 80 千电子伏 Ar^+ 离子进入铜的约化能量 $\varepsilon_L = 0.75$，是靠近低能离子散射区域的上限，具有不少低能离子散射的特征. $\varepsilon_L = 0.3$ 相当于 2 千电子伏 He 轰击铜，通常是 LEIS 的上限，它也相当于 30 千电子伏 Ar^+，而 $\varepsilon_L = 20$ 相当于 60 千电子伏的质子，则是 RBS 范围. 不过这些界限并不是固定不变的，随着散射角和实验要求不同而变化. 为了避免一些实际困难，在中能离子散射区域，我们选择两种极限情形：靠近低能离子散射的一端（如 80 千电子伏 Ar^+）和靠近“高”能离子背散射（RBS）一端（质子的卢瑟福散射），来考察这个能量范围的优缺点.

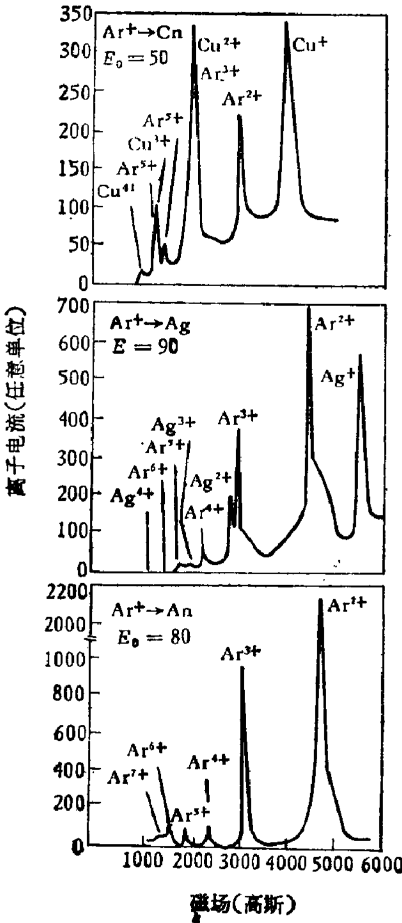


图 3.5-1 Ar^+ 离子对铜、银和金的背散射谱[29]

一 作为低能离子散射的上限

早期，观察低能离子散射谱所用的离子能量比现在高得多. 戴兹（Datz）和斯罗克（snoek）最早用 40—80 千电子伏惰性气体离子 Ar^+ 轰击铜、银和金靶并用 60° 扇形磁铁分析背散射粒子[29]，得到如图 3.5-1所示的谱. 图中尖的峰是离子同靶表面原子两体弹性碰撞背散射获得的，许多峰可能属于背散射 Ar^+ 离子不同的电荷状态. 散射离子的能量 E_1 仍由（3.1-2b）式或（3.4-1）式来描述. 在峰旁边的肩膀是多

次散射(多次碰撞)引起的. 多重散射(碰撞)对谱的相对贡献随离子电荷减小. 因此,原则上讲,从离子能量和散射角可以确定表面组分. 但是,所能看到的背散射粒子都是从表面散射的部分,因为这部分还保留着电荷. 大多数入射粒子穿进靶内的平均深度 ~500 Å,在表面区域激发了碰撞级联,引起辐射损伤和溅射. 溅射是固体在离子轰击下产生碰撞级联时发射的表面原子. 溅射产额正比于淀积到表面区域核运动的能量,反比于表面化学束缚能. 图 3.5-2 是各种离子在不锈钢上的溅射产额同离子能量的关系. 已知在我们目前讨论的能区,Ar^+ 的溅射产额大于1. 这就是说,在能量超过 200 电子伏时,靶原子溅射出的数目比散射大得

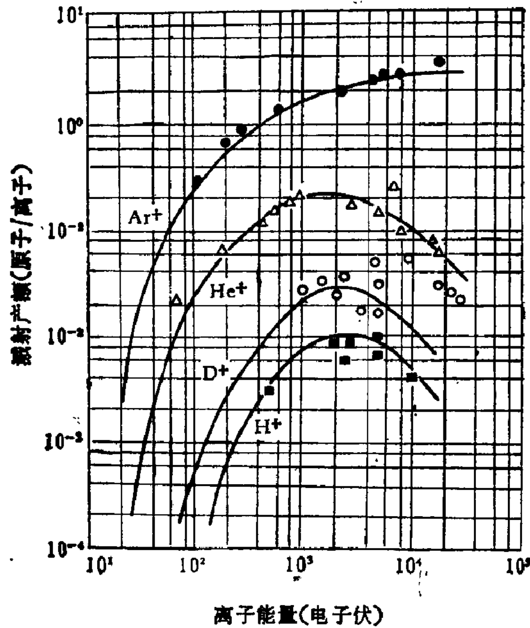


图 3.5-2 溅射产额同入射粒子能量的关系. H^+, D^+, He^+ 和 Ar^+ 离子入射不锈钢[30]

多. 显然,这是一种破坏性的方法. 另一方面,从深度剖析考虑,由于溅射使所研究的材料表面不断移去,从而可用背散射分析束对表面组分进行连续监测. 问题在于此时还会出现离子混杂和反

冲注入*)．不过，轻离子的溅射产额很低．例如，2—3 千电子伏质子溅射产额达到最大值也不过 10^{-4}，而在我们所讨论的能区，其溅射产额更低．所以，质子和氦离子溅射可以忽略，重离子溅射就不能忽略．图 3.5-3 是 15 千电子伏 Ne 离子对钒样品的散射($\varepsilon_L=0.43$)，通过此图可以看出溅射的影响．在(a)谱中清楚地见到氧的污染峰 ($Ne^+ \to O$)，而(b) 谱则是轰击剂量为 1.5×10^{-2}Cb/厘米^{2}之后，由于溅射而使表面的氧峰完全消失，但却出现了反冲钒离子的峰．这通常用作清洁表面．另一个特点是主峰有一个长的尾巴，表明离子穿透较深并从较深层背散射到表面时没有完全中性化．这一点已在上节图 3.4-3 中较为充分地表达出来．如果表面杂质较本体元素重，探测的灵敏度很高，所得的背散射谱类似于图 3.2-5．

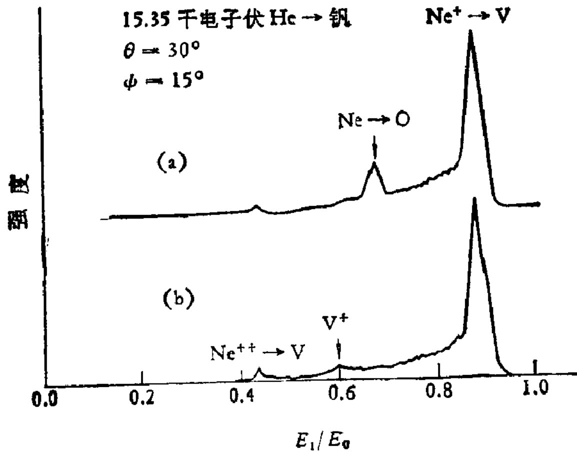


图 3.5-3 15.36 千电子伏 Ne^+ 自钒表面散射能谱[31]．(a)表面有氧污染；(b)经 1.5×10^{-2}Cb/厘米^{2}剂量的轰击之后

二 轻离子的背散射

能量为几万电子伏的轻离子背散射和卢瑟福(兆电子伏)背散

---

*) 离子混杂和离子注入在第七章中讨论．

射没有本质区别，也是定量分析表面组分的手段．在讨论低能卢瑟福背散射时，若单次碰撞假定是成立的，那么，能量 E_1 处能量间隔 ΔE_1 及探测器立体角 $\Delta\Omega$（图 3.1-4）内背散射粒子数 Δn 是

$$\frac{\Delta n}{n_0}=N\frac{Z_1^2Z_2^2e^4}{16\,\overline{\dfrac{dE}{dx}}}\left(K+\frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2}\right)\cdot\left(E_1+E_0\frac{\cos\theta_1}{\cos\theta_2}\right)^{-2}f(\theta)\Delta E_1\Delta\Omega \tag{3.5-1}$$

$$f(\theta)=4\left[\cos\theta+\left\{1-\left(\frac{M_1}{M_2}\sin\theta\right)^2\right\}^{\frac{1}{2}}\right]^2\cdot\sin^{-4}\theta\left\{1-\left(\frac{M_1}{M_2}\sin\theta\right)^2\right\}^{-1/2}$$

K 为运动学因子，由（3.1-2）式表示．$f(\theta)$ 是卢瑟福截面的角关联，n_0 是初能量为 E_0 的入射粒子数目，$\overline{\dfrac{dE}{dx}}$ 是平均的微分能量损失[见（3.1-24)式]．θ_1 和 θ_2 是入射束和出射束相对于靶表面垂直方向的夹角(图 3.1-9 所示)．

将方程(3.5-1)在区间 KE_0 和（3.1-16）式的 E_1 之间积分得到自薄膜散射到 $\Delta\Omega$ 内全部粒子数 n，

$$\frac{n}{n_0}=Nt\,\frac{Z_1^2Z_2^2e^4}{16E_0\bar{E}_1}\,\frac{f(\theta)}{\cos\theta_1} \tag{3.5-2}$$

$\bar{E}_1$ 是平均能量，与 E_0 密切相关：

$$\bar{E}_1=(E_0\cos\theta_1/\cos\theta_2+E_1)/(K+\cos\theta_1/\cos\theta_2) \tag{3.5-3}$$

式(3.5-2)与 $\dfrac{dE}{dx}$ 无关，E_1 由实验确定，θ_1，θ，$\Delta\Omega$ 等可选取合适的散射几何学，并测得 n 和 n_0，这样，就可绝对标定 Nt，即单位表面积的原子数目．从（3.5-2）式直接可看出，随着能量的降低，卢瑟福背散射的优越性更加显示出来，因为入射粒子初能量 E_0 减小，背散射粒子的数目 n 迅速增加，故对表面层的灵敏度也增加了．但是，入射能量的降低使得多次散射的几率增加(图 3.1-1b)，

从而使卢瑟福散射定律逐渐受到破坏.

现在,我们来估计一下多次散射的影响. 假定薄片厚度 t,垂直入射且散射角为 180°. 实验上可用环状探测器来实现,如图 3.5-4 所示. 由(3.5-2)式可知背散射几率为

$$P_1 = Nt\,\frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E_0^2}\,\Delta\Omega \tag{3.5-4}$$

因 $\theta = 180°$ 时,$f(\theta) = 1$. 若粒子首先以 $\theta > \theta_{\min}$ 的角度在间隔 $2\pi\sin\theta d\theta$ 和深度 t_1 处的散射,然后又在角度为 $180°-\theta$ 和深度 t_2 处发生第二次偏折,进入 $\Delta\Omega$ 后被记录下来. 这个过程的几率为

$$P_2 = \int_{\theta_{\min}}^{\pi}\int_0^t dt_1 N 2\pi\sin\theta d\theta\,\frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E_0^2} f(\theta)$$

$$Nt_2\,\frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E_0^2} f(180-\theta)\Delta\Omega \tag{3.5-5}$$

所有 $\theta < \theta_{\min}$ 的小角偏转均不予考虑,$\theta_{\min}$ 与探测器立体角 $\Delta\Omega$ 有关 ($\theta_{\min} = 5°$ 相应于距离为 10 厘米、直径为 1.7 厘米环形探测器所张开的立体角 $\Delta\Omega$).距离 t_2 取 $t_2 < t$.那么,对 t_1 积分得 t^2. 当 $M_1 \ll M_2$ 时,$f(\theta) = \sin^{-4}\dfrac{\theta}{2}$. 所以,对 θ 积分有

$$F(\theta_{\min}) = \int_{\theta_{\min}}^{\pi}\frac{d\theta}{\sin^3\theta}$$

(3.5-5)式积分有

$$P_2 = N^2 2\pi\left(\frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16E_0^2}\right)^2 F(\theta_{\min}) t^2\Delta\Omega \tag{3.5-6}$$

和

$$\frac{P_2}{P_1} = 2\pi N\,\frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16}\,F(\theta_{\min})\,\frac{t}{E_0^2} \tag{3.5-7}$$

$\theta_{\min} = 5°$ 时质子入射到镍和金箔上,二次碰撞的相对几率与薄片厚度的关系示于图 3.5-5. 从图中可以看出,穿透深度为 200 Å时,约有5%的二次散射对背散射产额有贡献. 这一点在估计卢

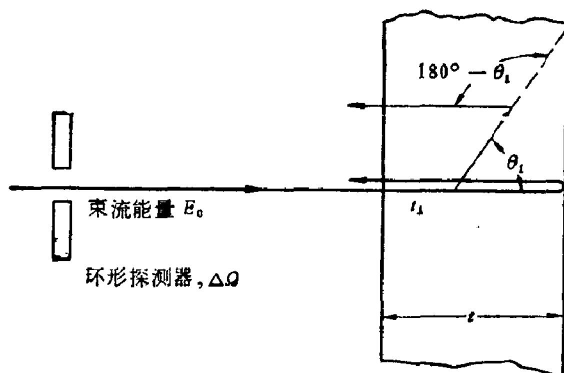


图 3.5-4　180°的散射几何学

瑟福背散射的低能限很重要．当入射粒子同靶原子多次碰撞占主要时卢瑟福散射定律就不适用了．

在质子能量低于 20 千电子伏时，整个背散射是多次大角偏转占主要的．根据(3.2-1)式，散射角度 θ 单次碰撞的弹性能量损失大于散射角 $\sum\theta_n = \theta$ 的多次碰撞．而电子能量损失仍正比于粒子轨迹的长度．图 3.5-6 是 15 千电子伏质子进入镍单晶后二维碰撞模型的计算机模拟．有些轨迹上注明了粒子离开表面时的能

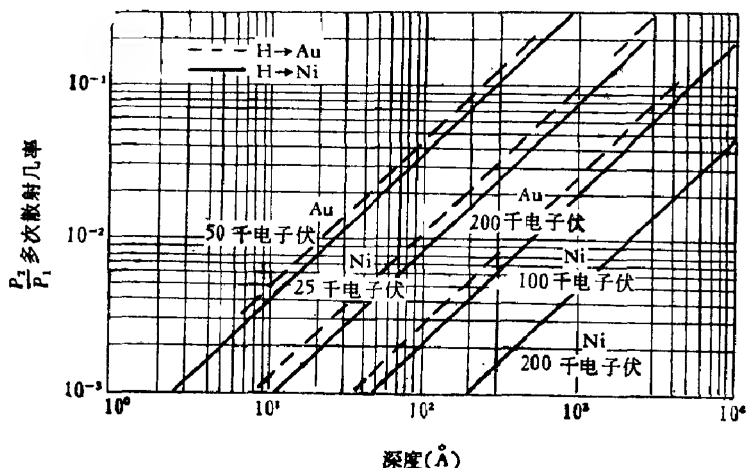


图 3.5-5　各种能量下质子在镍和金中多次散射几率(相对)同深度的关系[31]

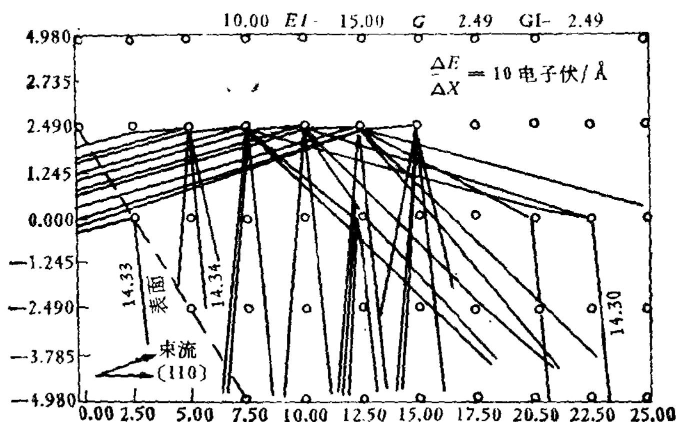


图 3.5-6 质子穿进镍单晶的计算机模拟[32]

量. 可以看到，路径很不相同的粒子却具有大致相同的能量. 这种效应既使在表面区域也极大地影响着深度分辨率.

几十万电子伏特（>100 千电子伏）能区的卢瑟福背散射也很成功地应用于材料特性的分析. 图 3.5-7 是 150 千电子伏质子背

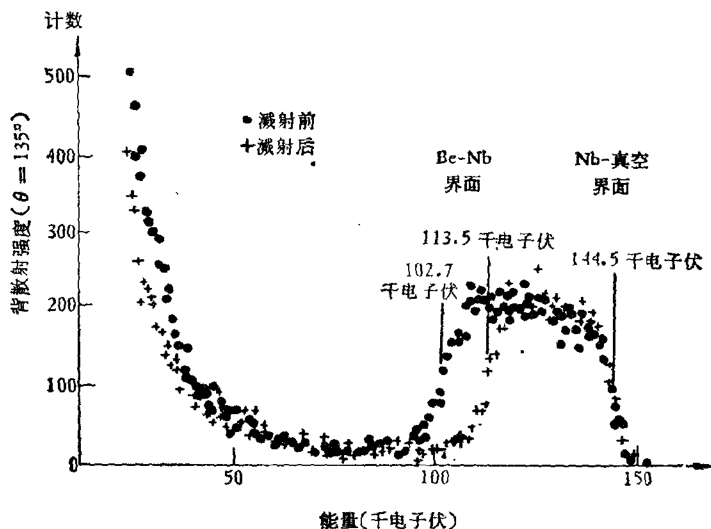


图 3.5-7 150 千电子伏质子自铌膜（铍衬底）上的背散射谱（D⁺溅射前后）[31]

散射谱确定铍衬底上铌膜的厚度及氘离子溅射引起铌膜变薄. 图中示出铌膜厚度有两种方法确定：在初离子剂量和探测器立体角已知时，可从总的背散射产额计算膜的厚度；如果绝对值不可测量，可从铌峰前后沿能量差求出厚度.这需要知道有关材料的$\frac{dE}{dx}$.目前情况下我们不得不假定薄膜中含有大量的氧，因为根据第二章布喇格规则，氧增强了阻止截面，这样两种方法所得结果才能一致.

另一个例子是用质子的卢瑟福背散射来研究 Al-Be-Nb 夹层结构. 图 3.5-8 为其背散射谱. 用 60、100 和 150 千电子伏三种不同入射能量所求出铌膜表面单位面积的原子数彼此相差在

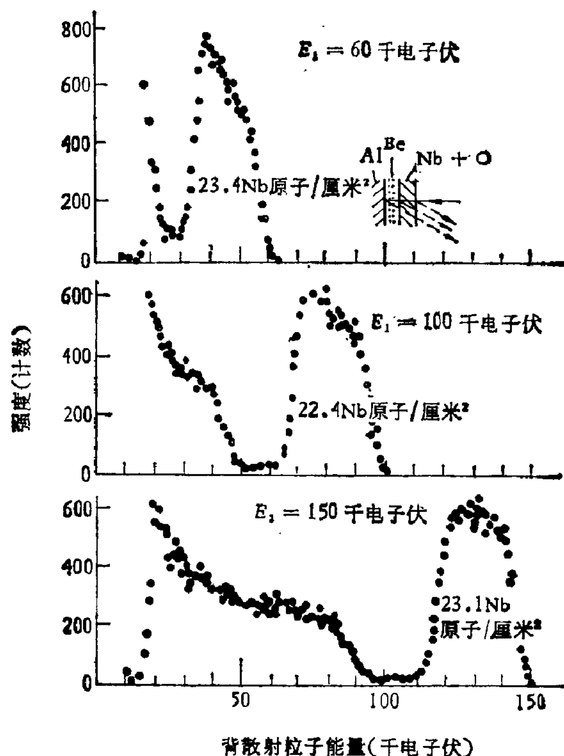


图 3.5-8 60、100 和 150 千电子伏质子自 Al-Be-Nb 夹层靶上的背散射谱[33]

5%以内．表明卢瑟福截面是成立的，能量在60千电子伏的情况下单次碰撞仍然是主要的．不过，当能量高时铌峰同衬底谱的前沿分得更开．峰谷中的强度是薄膜受到氧污染造成的．

图3.5-9是250千电子伏氦离子从很薄金层(35 Å)上的背散射谱，给出深度分辨率的意义．由§2.6和§3.2可知背散射粒子的能量展宽原因有：(i)分析器的分辨率；(ii)束流的角分散和探测器一定的立体角；(iii)靶表面的杂质层以及(iv)离子的能量离散随深度增加等．头三点可在实验条件下加以控制，最后一点影响着实际的深度分辨率．图3.5-9中的谱峰高能边沿(相当于

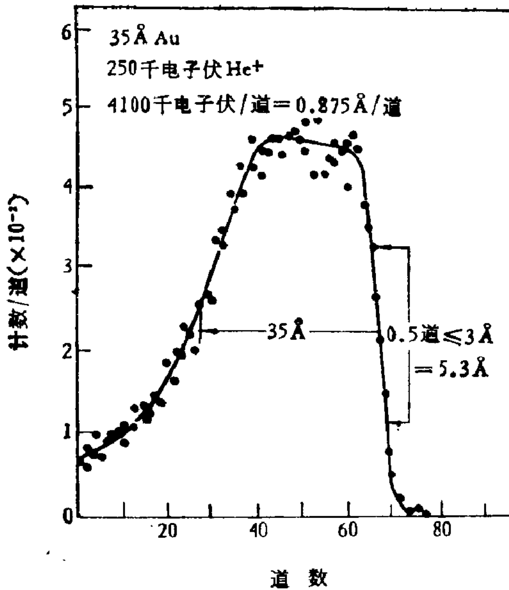


图3.5-9 $^4He^+$ 离子自35 Å厚的金膜上的背散射谱[34]

表面)的斜率是分析器的分辨率而低能尾巴的斜率则是分析器分辨率加上能量离散．如果采用§2.4的高斯分布，进行剥谱就可以确定能量离散．所得到的结果比理论预言的要大些．

在接近表面时深度分辨率要好得多，达到～5 Å，甚至有可能达到单原子层的数量级．不过，它对表面条件要求很严，杂质污染极少，故只有在超高真空和实地清洁样品才能做到．其外，低能边

沿斜率的另一个贡献是薄膜厚度的不均匀性，因为很薄金膜蒸发到衬底上会形成许多岛状平台.

三　背散射粒子的电荷态

在§2.7中我们已经讨论了离子穿进固体表面会中性化的各种因素. 在低能离子表面散射中（LEIS）只探测和分析带电粒子. 如果离子穿进固体较深，中性化的因素需要考虑. 伯克(Buck)等人测量了自金箔上背散射的中性氩原子[35]，发现从表面散射的离子中正离子部分确有一个很强的峰值，如图3.5-10所示. 当然，其中也有一些离子 Ar^+ 是从较深层处背散射出来的. 这些背散射粒子中离子部分的多少与初能量有关，且在相同的散射能量 E_1 时也会不同.

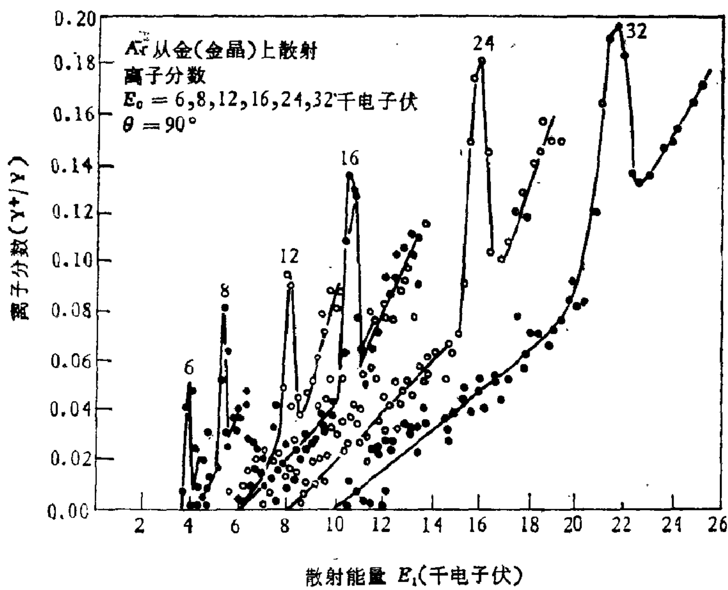


图3.5-10　不同初能量的 Ar^+ 离子自金靶散射后的带电部分[35]

质子散射的带电部分仅同出射粒子的速度有关而与深度和入射粒子的能量关系不大. 图3.5-11表明质子在不同固态物质上散射没有太大的差别. 不过，当能量低于20千电子伏时，由于表

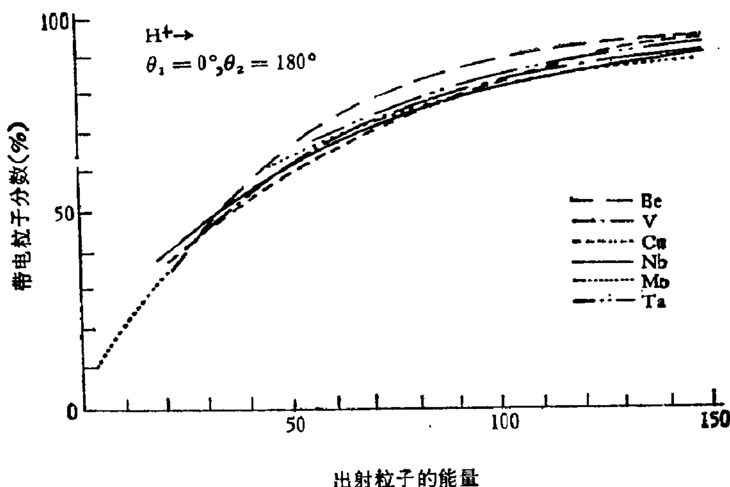


图 3.5-11 氢自不同靶上散射后的带电分数[36]

面污染(如氧)则影响较大. 图 3.5-12 就是金表面清洁前后，经质子背散射得到氢离子部分. 显然，污染表面对散射离子中性化影响很大. 一般，低于 40 千电子伏能量时，有 50% 以上的背散射粒子是中性的，进行定量分析是必须考虑的. 在低能下带电粒子和中性粒子的能量分布形状是不同的. 因此，一般不可能单从带电粒

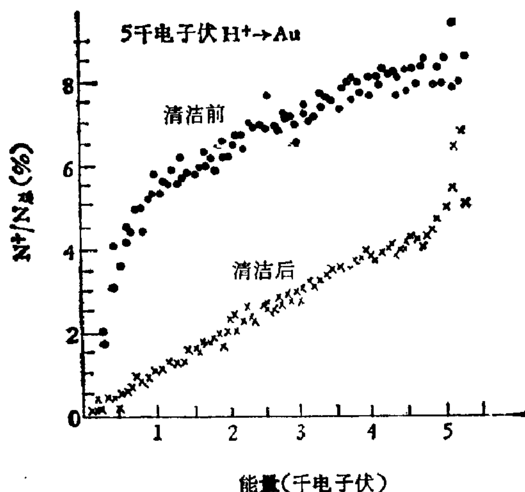


图 3.5-12 氢自金表面清洁前后背散射的带电分数

粒子推出所有背散射粒子的分布形状．观察背散射粒子电荷状态的物理学内容至今还未完全搞清，它不仅受到表面特性的影响而且也受到本体材料的影响，这在§2.7已经讨论过．

§3.6 粒子感生X射线发射(PIXE)

在粒子同固体中原子碰撞过程中，从原子内壳层发射电子的几率很大．此种内壳层"库仑电离"所形成的空穴通过发射X射线或无辐射的俄歇跃迁所填充，这就是空穴衰变过程．如图3.6-1(a)所示．其能量代表轰击原子的特征，所积垒的谱表明分析样品中

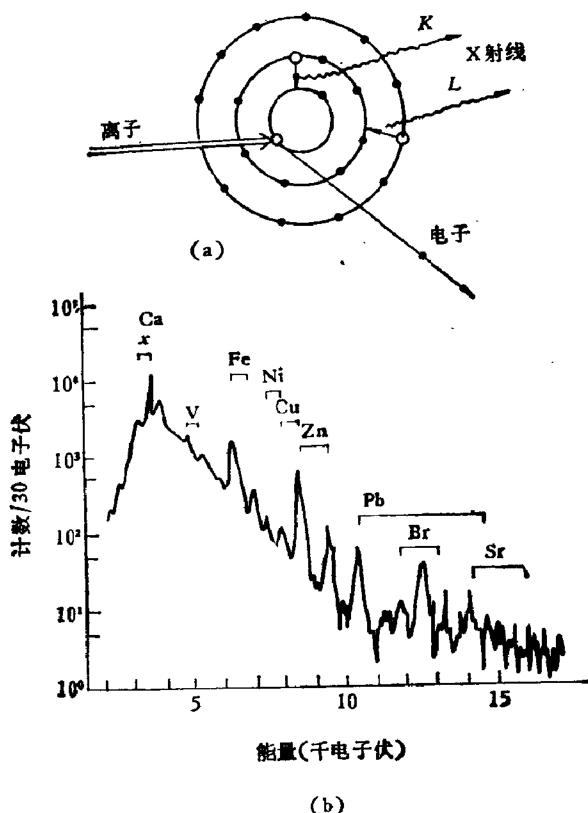


图3.6-1 X射线产生示意图(a)及(b) 3兆电子伏质子轰击空气中灰尘样品的X射线谱[38]

存在的元素[如图 3.6-1(b)]．由于该过程发射特征X射线的截面大，而且现有X射线探测器能量分辨率可分辨所有较轻元素的特征 K-X 射线，因此，在杂质微量分析中愈来愈成为一个重要的手

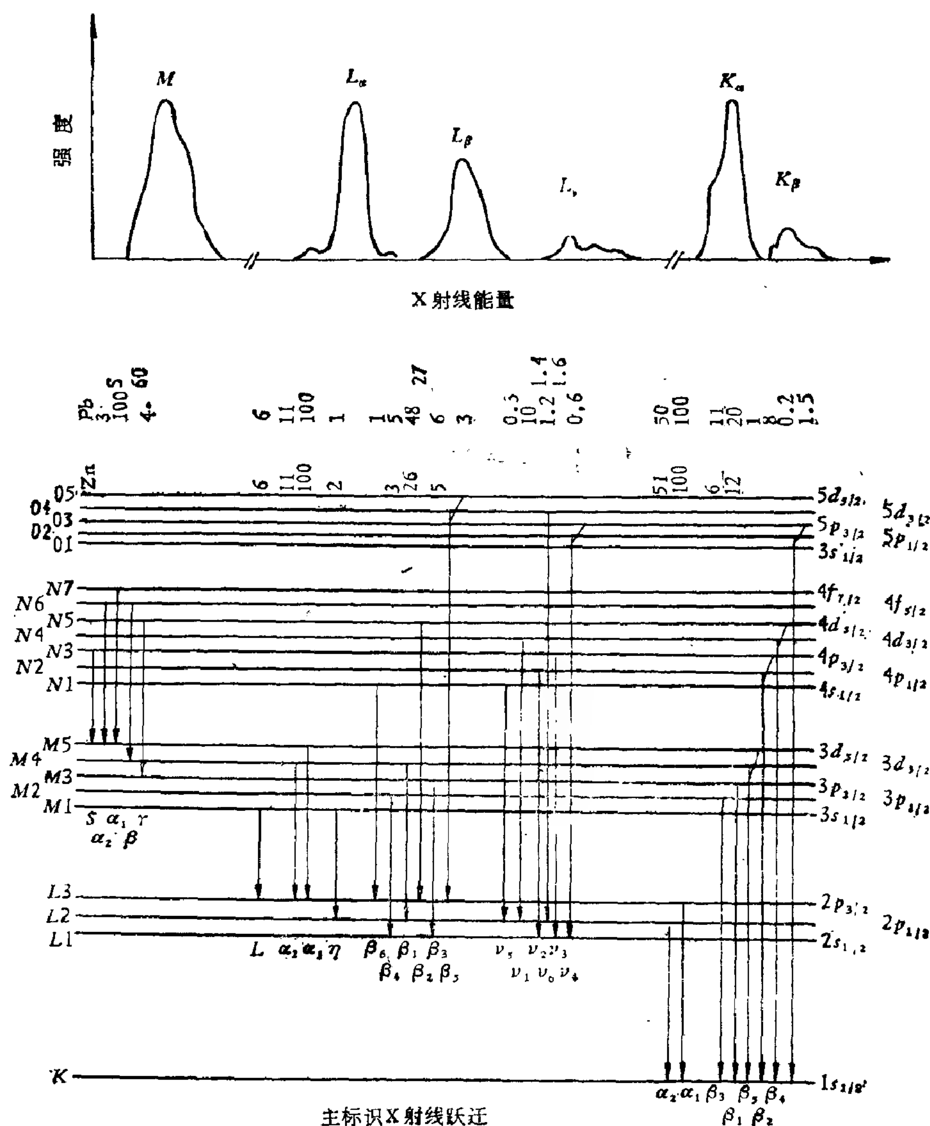


图 3.6-2　原子能级间的X射线跃迁，并给出每组跃迁的相对强度比(铅和锌)

段[37].

图 3.6-2 给出表征特定元素在原子跃迁中发射X射线示意图.有几根主要谱线，如 K_α 和 K_β 或者是 L_α、L_β 和 L_γ 等,并伴随着强度较弱的谱线. 叫侍线. 在每组（K, L 和 M）内强度比是一个常数(如图 3.6.2 中的锌和铅)，从而得到鉴定元素的指印图案. 其主要特征是各种靶元素X射线能量有位移（正比于靶原子序数 Z_2 的平方). 这些标识X射线同激发的离子(或电子、质子等)关系不大,因此可用来确定样品中的元素. 而且，不同组（K, L 和 M）X 射线的相对和绝对强度与激发的离子和能量有关. 这里先讨论离子激发产生X射线的基本原理，X射线的探测方法，然后再说明它在元素分析中的应用.

一 轻离子产生X射线

从分析的角度看，质子和氦离子是激发X射线最通用的离子，而且产生X射线的物理过程也比较清楚. 我们在§2.7已经谈到人射粒子同靶原子电子几种可能的相互作用过程，特别是损失电子的情形对离子电荷状态的影响. 现在我们进一步讨论离子的原子核(原子序数 Z_1、质量 M_1 及能量 E_1）和靶中原子的每个电子(质量为 m)之间库仑相互作用而使靶原子放出内壳层电子，形成空穴的过程. 在经典情况下这种空穴产生可用“两体碰撞近似”(BEA）来计算[39](如§1.3). 在量子力学情况下，常常也采用“两体碰撞近似”,即是说，在一个原子内一个特定电子碰撞电离同其它电子没有关系.

假定电子之间没有关联，满足 BEA 近似，根据§1.3的讨论，由图 3.6-1(a) 和图 3.6-2， 在具有 N_K 个 K 电子的原子内同时产生一个 K 空穴和 n 个 L 空穴的截面可以写成

$$\sigma_{1K,nL} = N_K \int_0^\infty 2\pi b P_K(b) P_{nL}(b) db \qquad (3.6\text{-}1)$$

其中 b 为碰撞参数,(注意：在§1.3中，b 为碰撞直径，p 是碰撞参数）$P_K(b)$ 和 $P_{nL}(b)$ 分别是产生单个 K 空穴和 n 个 L 空穴的

几率．进一步区分 L 壳层，$2s$ 子壳上产生 i 空穴和 $2p$ 子壳上有 j 个空穴，则有

$$\sigma_{1K,ij}=N_K\int_0^\infty 2\pi b P_K(b)P_{ij}(b)db,\quad i+j=n \qquad (3.6\text{-}2)$$

是 P_{ij} 可表示成

$$P_{ij}=C\binom{2}{i}[P_{2s}(b)]^i[1-P_{2s}(b)]^{2-i}$$

$$\cdot C\binom{6}{j}[P_{2p}(b)]^j[1-P_{2p}(b)]^{6-j} \qquad (3.6\text{-}3)$$

式中 $P_{2s}(b)$ 和 $P_{2p}(b)$ 分别是移去 $2s$ 和 $2p$ 电子的几率．二项式系数 $C\binom{m}{n}$ 代表统计分布．应该指出 n 相同但 $2s$ 和 $2p$ 子壳上的布居不同的态是不能循环的．

空穴产生截面和观察到 X 射线谱之间的关系是

$$\sigma^X_{K,nL}=\sum_{ij}\sigma_{Kij}\omega_{ij},\quad i+j=n \qquad (3.6\text{-}4)$$

ω_{ij} 是平均的荧光产额．由于外层电子填充空穴并不总是发射 X 射线，能量有时会传给另外一个次外层电子，并以俄歇电子发射出来(见 § 2.7)，所以，X 射线荧光产额是

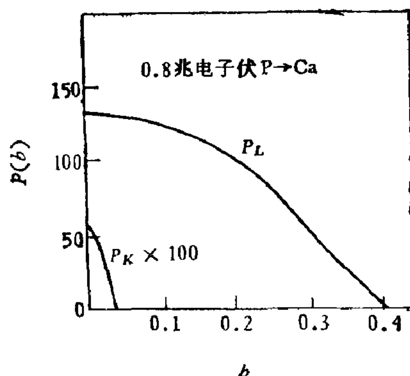


图 3.6-3　用二体碰撞近似(BEA)计算 0.8 兆电子伏质子电离钙时的 $P_K(b)$ 和 $P_L(b)$[41]

$$\omega_{ij} = \frac{\Gamma_X}{\Gamma_X + \Gamma_A} \tag{3.6-5}$$

其中 Γ_X 和 Γ_A 分别是辐射和非辐射(俄歇)跃迁率. 显然，当碰撞参数 b 大于 K 壳层半径时 P_K 趋于零. 计算结果表明[40]，$P_{2s}(b)$ 和 $P_{2p}(b)$ 在这个碰撞参数范围内接近常数，如图 3.6-3 所示. 因此在方程(3.6-2)中被积函数不为零的区域，$P_{2s}(0)$ 和 $P_{2p}(0)$ 可取为不变的"平均"几率，于是把它取到积分号外得到

$$\begin{aligned}\sigma_{1K,ij} &= N_K P_{ij}(0)\int_0^\infty 2\pi b P_k(b)db \\ &= N_K P_{ij}(0)\sigma_K\end{aligned} \tag{3.6-6}$$

其中 σ_K 是 K 壳层空穴产生截面.

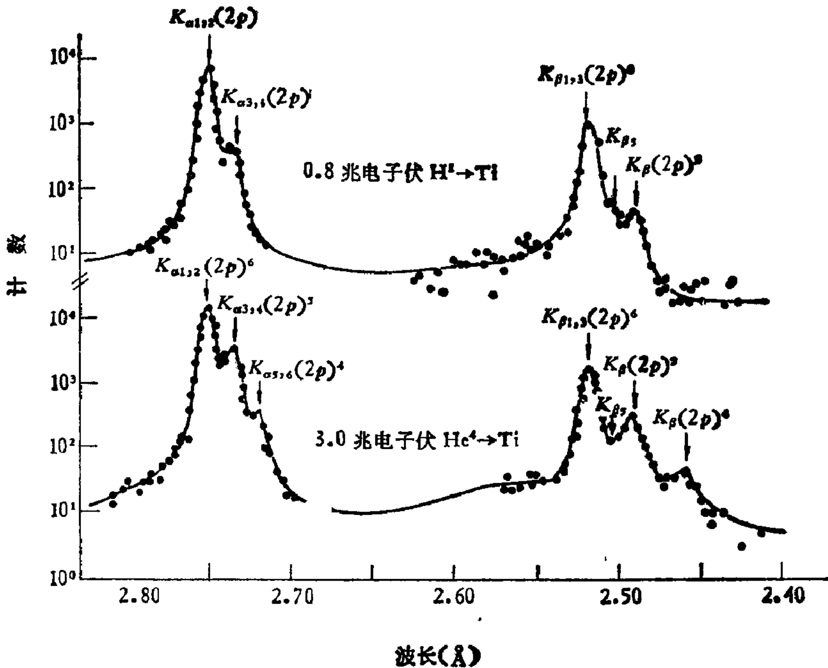


图 3.6-4 质子和 α 粒子轰击钛产生的 K-X 射线*)

*) C. F. Moore, M. Senglaub, B. Johuson, and P. Richard, *Phys. Rev Lett.*, **40A**, 107(1972).

$\sigma^X_{1K,nL}$ 对总的 K_α X 射线产额之比是

$$R^X_n = \sigma^X_{1K,nL}/\sigma^X_K = \sum_{ij} P_{ij}\omega_{ij} \Big/ \sum_{n=0} \sum_{ij} P_{ij}\omega_{ij} \qquad (3.6\text{-}7)$$

因此，改变参数 $P_{2s}(0)$ 和 $P_{2p}(0)$ 可拟合 R^X_n 的实验值. ω_{ij} 值可从理论计算出. 若取 ω_{ij} 为常数并对所有的组态均相等就可以观察到定性的趋势. 而且，所得到的几率对 P_{2s} 和 P_{2p} 之间的差别确实不很灵敏，因此，常常只取平均的 L 壳层电离的几率 $P_L(0)$ 就够了.

$$R^X_n \approx P_n = \binom{8}{n}[P_L(0)]^n[1-P_L(0)]^{8-n} \qquad (3.6\text{-}8)$$

只要电离程度不太高，略去荧光产额的差别是可以的.

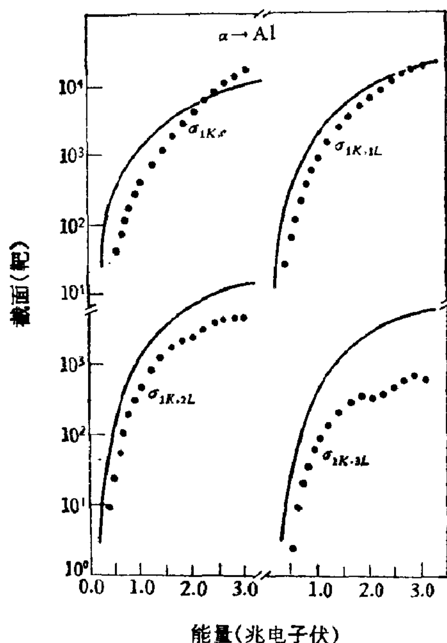


图3.6-5 α 粒子轰击铝 (K_α 组合态是 1 个 K 空穴和 0，1，2，3 的 L 空穴) 的多重电离截面. 实线是 BEA 计算结果*)

*) P. Richard, R. L. Kauffman, J. H. McGuire, C. F. Moore and D. K. Olsen, *Phys. Rev.* **A8**, 1369(1973).

上述分析所得到的几率同 L 壳层电离截面的关系是

$$P_{2p}(0)=\frac{\sigma_{2p}/n_{2p}}{2\pi\langle r_{2p}^2\rangle} \tag{3.6-9}$$

其中 σ_{2p} 是电离截面，n_{2p} 是 $2p$ 电子的数目及 $\langle r_{2p}^2\rangle$ 是子壳层平方半径，通常由理论计算得到. 最简单的情况是，入射粒子为轻离子，如质子或 α 粒子. 此时，电离除 s 产生 K 空穴外，多数只产生一个 L 空穴，最多也不超过两个 L 空穴，如图 3.6-4. 图 3.6-5 给出 α 轰击铝 K_α 组态的多重电离截面的测量结果，两体碰撞近似理论给出了趋势.

现在，我们来略为仔细一点讨论(3.6-6)式中 K 空穴产生截面 σ_K. 在两体碰撞近似（BEA）下，K 空穴产生截面具有很简单的结果[39]

$$\sigma_K^{\mathrm{BEA}}=\frac{Z_1^2}{U_K^2}f\left(\frac{mE_1}{M_1U_K}\right) \tag{3.6-10}$$

U_K 是靶原子中 K 壳层电子的束缚能，函数 f 可从图 2.7-3 中读出. 如果 $U_K=\frac{1}{2}mv_c^2$ 和 $E_1=\frac{1}{2}M_1v^2$，方程(3.6-10)式可写成 $\left(\frac{v}{v_c}\right)^2$ 标度，即是说，截面的关键参数是入射粒子速度和原子电子的平均速度的比率. 图 2.7-3 已经给出质子轰击实验结果同(3.6-10)式理论结果很符合. 对 L 和 M 壳层也有类似的公式. 若不是质子而是其它离子(Z_1A_1)，靶相同即束缚能 U_K 相同，则(3.6-10)式可外推任何速度相同的离子

$$\sigma_{Z_1A_1}(E_1,\ Z_2)=Z_1^2\sigma_{质子}\left(\frac{E_1}{A_1},\ Z_2\right) \tag{3.6-11}$$

微扰理论(如半经典近似[41]和平面波玻恩近似[42])也可以处理这样的过程，计算空穴产生，得到的结果与(3.6-10)式类似. 如果靶原子 K 壳层电子的电荷因受到其它电子的屏蔽，则

$$Z_K=Z_2-0.3 \tag{3.6-12}$$

相应的能量是 $E_K=Z_K^2\cdot 0.0136$ 电子伏，K 壳层电子平均速度

$v_K = \left(\frac{2E_K}{m}\right)^{1/2}$ 和半径 $a_k = a_0/Z_K$(a_0 是玻尔半径)。于是，能量参数是

$$\eta_E = \left(\frac{v}{v_K}\right)^2 = \frac{m}{M_1}\frac{E_1}{E_K} = \frac{E_1}{A_1 \cdot Z_K^2 \cdot 25\text{ 千电子伏}} \quad (3.6\text{-}13)$$

在有屏蔽时，电子实际的束缚能是

$$\Lambda_K = U_K/E_K = U_K/(Z_K^2 \cdot 0.0136\text{ 千电子伏}) \quad (3.6\text{-}14)$$

及在平面波玻恩近似中的K空穴产生可以写成

$$\sigma_K^{\text{PWBA}} = \frac{8\pi Z_1^2}{\Lambda_K Z_K^4} a_0^2 F\left(\frac{\eta_E}{\Lambda_K^2}\right),\ a_0 = 5.29 \times 10^{-11}\text{ 米} \quad (3.6\text{-}15)$$

这里函数F由图 3.6-6 给出。方程(3.6-15)与方程(3.6-10)很接近，只要把函数中F标度乘以Λ_K就可以了。(3.6-11)式也适用于

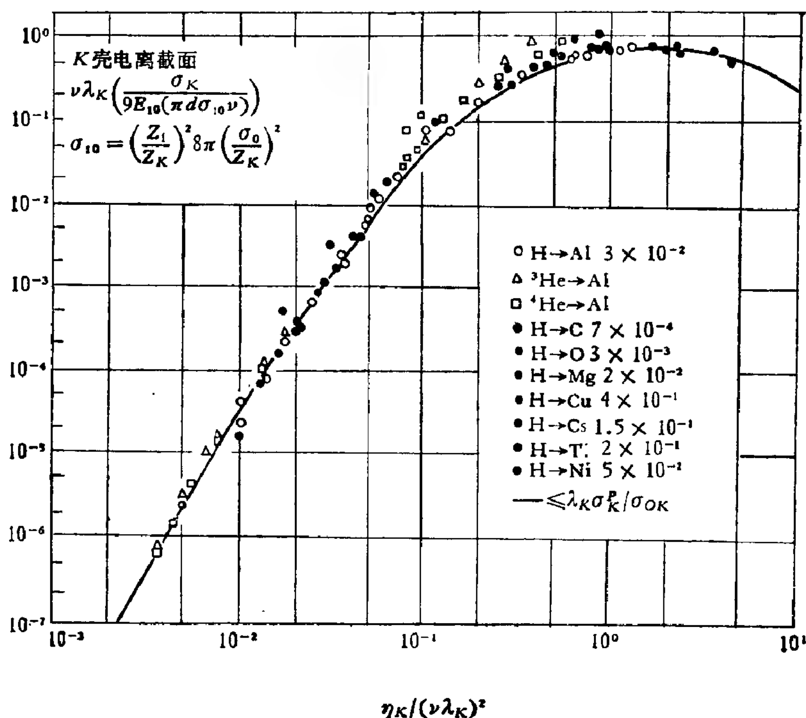


图 3.6-6 PWBA 计算的K空穴产生[方程(3.6-12)到(3.6-17)]，点为质子和氦离子实验结果，曲线是理论计算的

(3.6-13)式.

平面波玻恩近似(PWBA)或半经典近似(SCA)计算时在电离过程中引入微扰，从而直接影响到最后的截面. 空穴产生的物理因素有:

(i) 增加束缚能(分子轨道的形成);

(ii) 入射粒子的库仑偏转;

(iii) 极化(碰撞中电子分布);

(iv) 相对论波函数(重靶情况);

(v) 屏蔽(靶的波函数中);

头三项代表附加的物理过程，已经给出了; 后二项则不可能用(3.6-15)式表达很清楚.

如果入射粒子速度高,穿透靶原子较深，那么，一个电子的束缚能不仅受到靶核电荷的影响,而且也受到入射粒子电子的影响. 这种有效束缚能的增加意味着电离截面降低. 于是,方程(3.6-15)中的 Λ_K 应用 $\nu\Lambda_K$ 来代替, ν 是与速度有关的因子,可近似表示成

$$\nu = 1 + \frac{2Z_1}{Z_K\Lambda_K}\cdot\frac{1+5\xi+7.14\xi^2+4.27\xi^3+4.97\xi^4}{(1+\xi)^5} \quad (3.6\text{-}16)$$

$$\xi = \frac{2v}{\Lambda_K U_K} = 2\eta_E^{\frac{1}{2}}/\Lambda_K$$

入射粒子在靶原子库仑场中偏转也会降低电离截面. 特别是在入射粒子速度低和靶原子序数 Z_2 高时此效应特别显著，会在 PWBA 的结果上又加了一个因子,所以

$$\sigma_K = \frac{9e^{-\mu}}{9+\mu}\cdot\frac{8\pi Z_1^2}{\nu\Lambda_K Z_K^4}a_0^2F\left(\frac{\eta}{(\nu\Lambda_K)^2}\right) \qquad (3.6\text{-}17)$$

$$\mu = \frac{\pi m Z_1 v}{2M_1\Lambda_K^2}\cdot\left(\frac{\eta}{\Lambda_K^2}\right)^{-3/2}$$

因子 $9\exp(-\mu)/(9+\mu)$ 是图 3.6-6 中函数 $9E_{10}(\mu)$的近似值.

极化表示碰撞期间电子束缚态的变形，在入射粒子速度高时尤为显著，它使电离截面增加. 对靶电子波函数作适当处理可以得到较重元素和相对论运动下的截面. 至于外壳层电子屏蔽效应

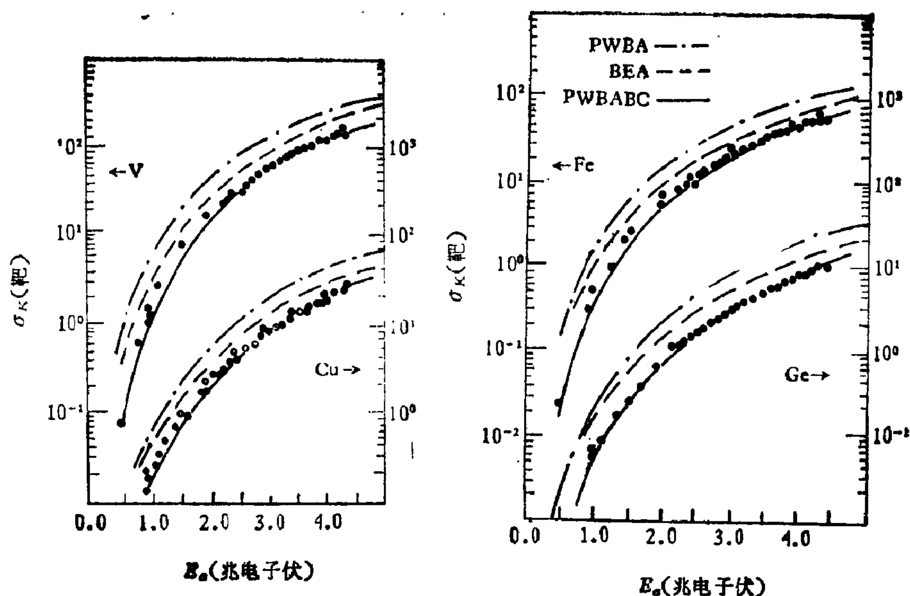


图 3.6-7 0.5—4.4 兆电子伏 He 离子在 $_{23}V$，$_{26}Fe$，$_{29}Cu$ 和 $_{32}Ge$ 上的产生 KX 射线截面．理论曲线分别是 PWBA [(3.6-15)式]，BEA [(3.6-10)式]和 PWBABC [(3.6-17)式][43]

[如(3.6-14)式]，最好采用哈特里-福克（Hartree-Fock）自洽波函数的办法．

上述理论同实验结果比较示于图 3.6-7[43]，其中方程（3.6-10）式的 BEA 和(3.6-15)式的 PWBA 结果均比实验值高，而(3.6-17)式的 PWBABC 与实验符合很好，它经过了束缚能和库仑偏转修正，有时称为静态微扰计算（PSS-Perturbed Stationary State Calculation)．

二 重离子产生 X 射线

重离子轰击发射 X 射线不仅受上一节所谈的诸因素影响，而且还有一些新的因素影响着 X 射线的强度和结构．从物理上说，X 射线辐射的复杂性可能存在着一些别的物理过程，会有新的应用，但在进行样品分析时必竟要复杂得多了．

从方程（3.6-11）看出，重离子轰击使空穴产生截面高主要是

由于直接的库仑激发与 Z_1^2 标度有关. 各种轨道之间耦合使分子轨道形成和空穴转移，构成很重要的激发机理，并且出现共振和低能处有一个阈值. 特别是在入射粒子速度远小于轨道电子速度 $v \ll v_e$ 时，电子轨道在碰撞期间能绝热地调到入射粒子-靶原子核间有固定距离的情况. 于是电子将绕着两个中心构成的分子运行，且一个态的束缚能是原子核间距离的函数[34]. 例如，对 K 壳层而言，从两个原子原来是分开的到两个原子核紧靠一起形成一个统一的分子，其电子束缚能是随碰撞距离的减小而增加的. 其它分子轨道遵从不同的曲线，可以彼此接近也可在一定距离处交叉. 这时，较高壳层产生空穴的几率高并会转移到较低的壳层. 这种耦合强度的重要参数是有关能级束缚能之差和碰撞速度. 在 $Z_2 \sim Z_1$ 时此效应尤为显著. 例如，对于接近对称的碰撞，L 空穴可以转变

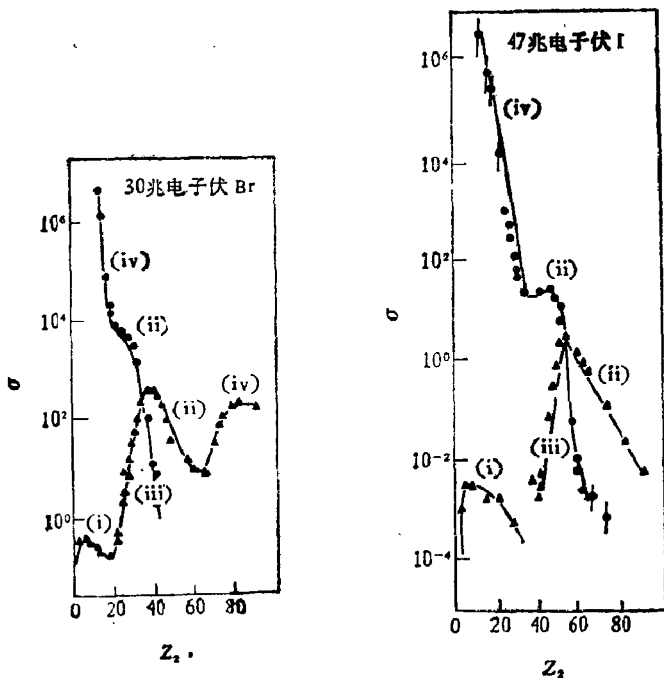


图 3.6-8 重离子 K 空穴产生[44]. 圆点表示靶的 X 射线，三角形表示入射粒子的 X 射线

成K空穴[44]并在靶原子序数接近入射粒子时看到靶的 K-X 射线有峰结构，如图 3.6-8. 固定 Z_1，直接的库仑激发截面随 Z_2 的增加而减小. 当入射粒子能量较低时很清楚地看到有共振，而且第一个电离过程具有阈值，它同入射粒子-靶的组合有强烈的依赖关系，至使在分析时能把各种不同的元素很好地分开. 然而，由于截面低及定量数据少，还不能在实际分析中有很多的应用.

在重离子情况下，入射粒子空穴俘获电子会对靶电离作贡献. 电子跑到入射粒子上同发射到连续区一样重要（BEA 或 PWBA 描写的是发射到连续区）. 它取决于离子的电荷状态，在离子的空穴多时较高. 在固体靶表面层束流离子因俘获电子而激发，而靶

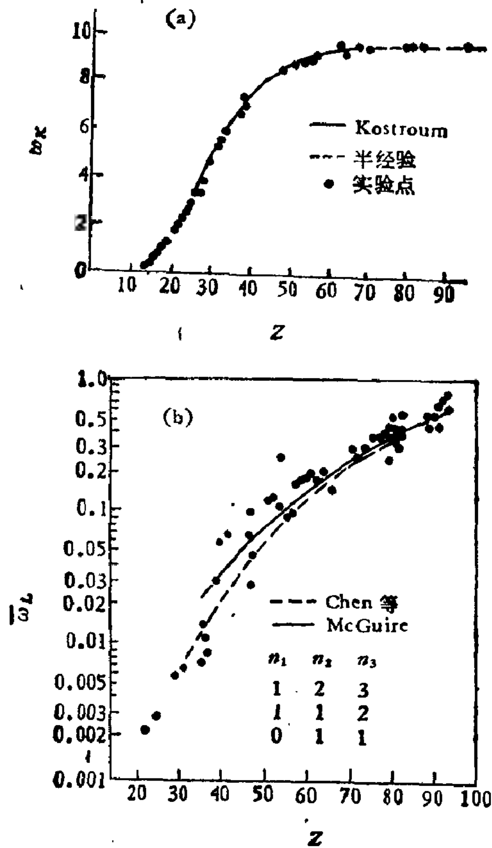


图 3.6-9　由方程(3.6-5)得到 X 射线荧光产额 (a) K 壳层 (b) L 壳层[49]

激发又依赖于入射粒子的电荷状态，两者合成空穴产生截面与靶厚有关．况且，样品中主要元素也会通过分子激发机理来影响入射粒子的激发．样品中反冲原子会从入射重离子的大动量转移获得高的速度并且通过高的分子激发（$Z_2\sim Z_1$）对激发截面作非直接的贡献．

(3.6-5)式荧光产额确定X射线强度适用于入射轻粒子（H^+和 He^+），如图3.6-9所示，也适用于重离子碰撞．不过，所得的值比图3.6-9要高，因为这时电离度高．当靶原子外壳层为电子耗尽时，通过俄歇电子发射来填充空穴的几率很小．于是，内壳层空穴的填充几乎均是通过发射X射线，即，$\omega=1$．一般情况下，人们必须采用平均荧光产额，其值高于图3.6-9的值，并且随入射粒子的种类、能量和电荷态变化．图3.6-10中，50兆电子伏氯离子轰击氖产生K-X射线(下部)及俄歇电子（上部）截面．俄歇产生

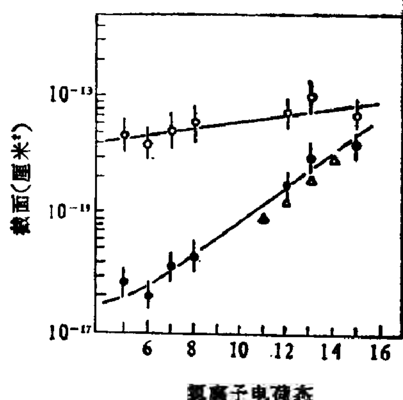


图3.6-10　50兆电子伏Cl离子轰击时Ne产生K-X射线(下部)和俄歇截面(上部)．总空穴产生$\sigma_{tot}=\sigma_X+\sigma_{俄歇}$及$\omega_K=\sigma_X/\sigma_{tot}$均随氯电荷态增加[46]

截面高，但随着入射离子电荷态的增高而增加很快，因为此时外壳层电子变少，所以经俄歇电子衰变道的几率也随之减少．

在离子感生X射线谱中除了已经讨论过的强度以外，还有另一个重要的特征，即精细结构．由于在离子碰撞中电离度高，多重

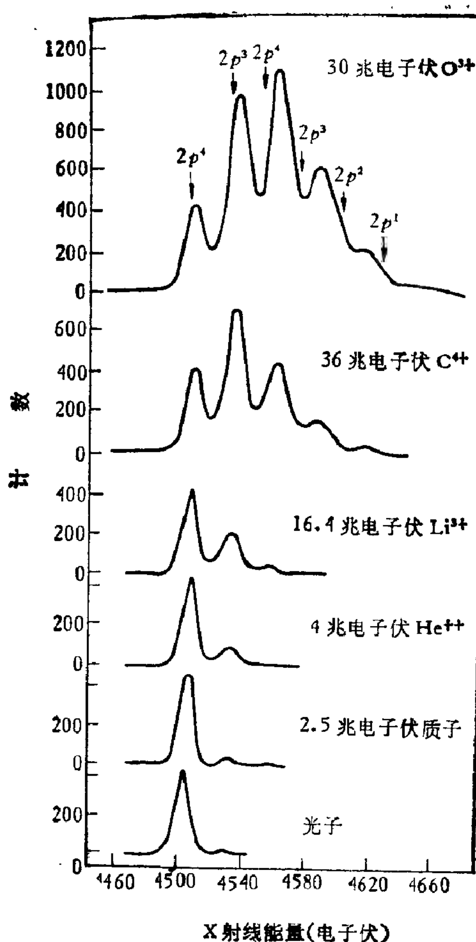


图 3.6-11 用光子、质子以及 Z_1-直增加到氧的各种离子轰击钛靶得到 Ti K_α 侍从谱线[47]. 箭头表示用 $2pL$ 空穴数目计算的能量位置，但未考虑M或N空穴数目

空穴存在，使X射线能量位移，因此，会在主线旁附加一组侍从线. 图 3.6-11 是使用平面晶体[47]探测光子、质子以及 Z_1 一直增加到氧的各种离子轰击钛靶得到 Ti K_α 侍从谱线. 可以看出侍线的强度和复杂程度均随 Z_1 增加而显著增加. 这是因为在L壳层中逐渐增加了空穴态. 当 Z_1 最高时，还出现M壳层的空穴，使谱线移

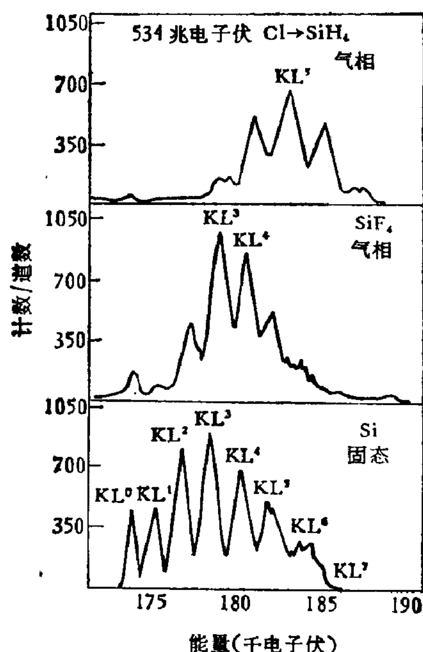


图 3.6-12 自气体和固体靶得到的 Si K_{α}-X 射线侍线谱[48]

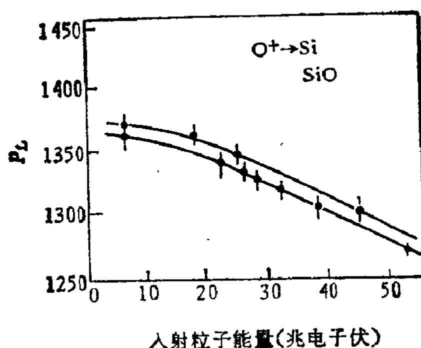


图 3.6-13 不同能量氧离子轰击硅和氧化硅靶得到硅 K_{α} 侍线的能移[49]

向高能端。

固体靶的侍从谱线不仅由新电离确定，而且受碰撞后但在内壳层衰变前的外壳层弛豫影响。图 3.6-12 给出两个气体靶和一个固体靶的 Si K-X 射线[48]。SiH_4 气体靶最接近于同硅没有扰

动的碰撞，K-X 射线是从失去 5L 电子的态发射的. 而 SiF_4 气体靶则失去了 3—4L 电子，这意味着它作了重新排列，即是，一些 F 的价电子被空穴俘获. 这在固体靶(固态 Si) 更为突出，谱线范围很宽并转移到更低的 L 空穴. 所难理解的是相对强度却不小.

根据观察值 P_L 分析侍线谱可给出样品中原子结构信息，如图 3.6-13. 随着束流能量的增加，侍线移向数目较低的 L 空穴，也即较低的 $P_L = \Sigma n \cdot f_n/N_L$，其中 f_n 是第 n 个侍峰占总 K_α-X 射线产额的分数，N_L 是基态原子中 L 壳层的电子数目. 图 3.6-13 是氧离子轰击硅的 K-X 射线同入射粒子能量的关系. 对一个厚靶，它可告知X射线发射的束流平均能量或平均深度. 更为重要的

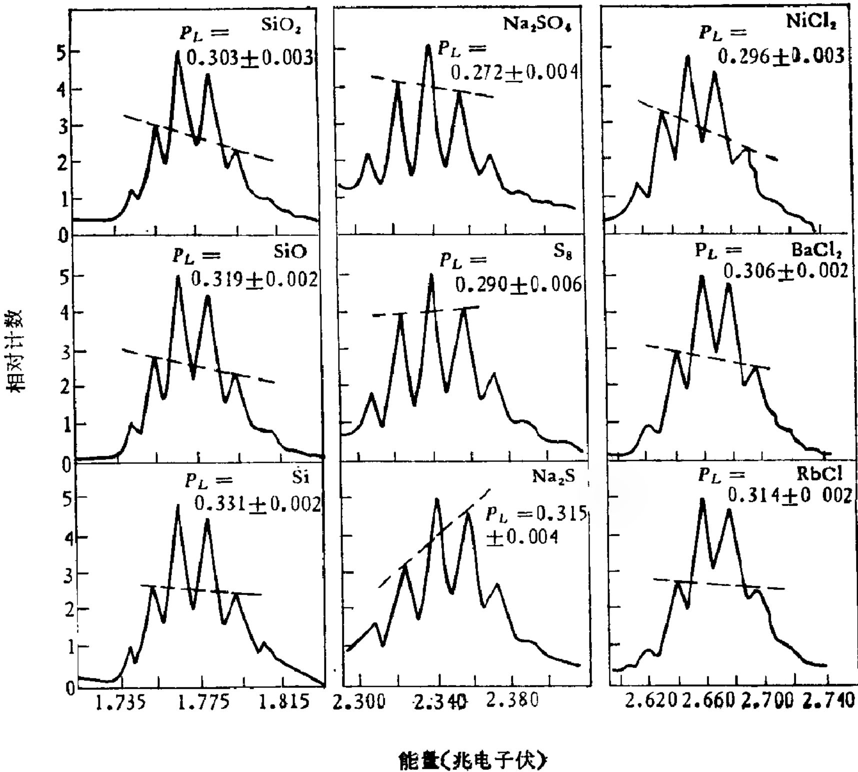


图 3.6-14　32.4 兆电子伏氧离子轰击硅、硫和氯不同化合物发射 K_α 侍线谱[49]，显然与元素的化学环境有关

是，不同的化学环境（Si 和 SiO）给出不同的能移．这在图 3.6-14 中看得更加清楚，其中硅、硫和氯的 K-X 射线均有三种不同的化合物，所得到的 P_L 值也示于图中．可用价电子密度来对这些谱作简单的解释． 由图 3.6-15 所示，P_L 随着价电子密度的增加而减少，因为它们被最初产生的靶空穴所捕获，类似于图 3.6-12 的情形．这些观察很有价值，不仅打开了用简单的X射线测量分析材料中的元素组分而且可得到化学信息．

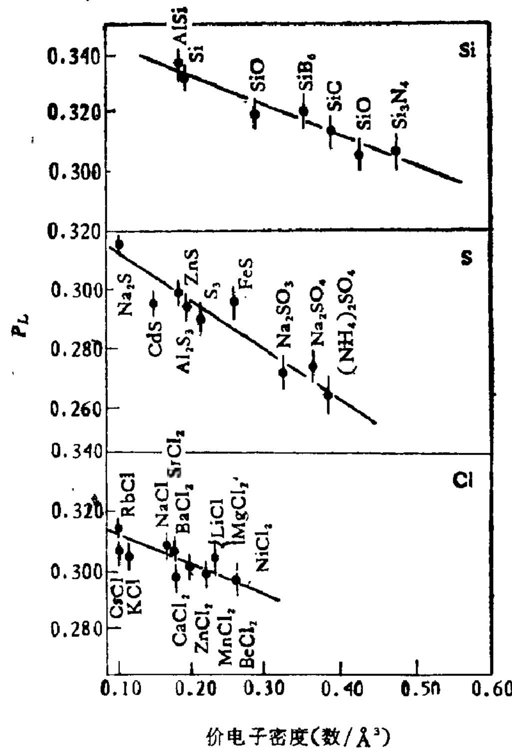


图3.6-15 伴线的化学位移．P_L 同 Si，S和 Cl 的价电子密度关系[49]

同轻离子激活X射线比较，重离子激活X射线截面高，分子激活的选择性以及精细结构可获得许多新的信息．但是，由于多种激发因素使结果解释复杂以及多伴线的展宽效应，使其在应用上

带来不少困难.

三 X射线探测

离子感生X射线分析的实验装置比较简单. 常用1—4兆电子伏/a.m.u 的质子或He离子轰击样品. 探测器放在样品周围探测辐射,样品可放在真空中,也可在低温炉内. 探测器可用闪烁探测器和正比计数器(如我国目前生产的2J-101X 射线正比计数器可用于X射线探测). 由于半导体探测器具有极好的能量分辨率,它在探测X射线上特别引人注意. Li 漂移 Si 或 Ge-Si(Li) 及 Ge(Li) 或本征 Ge 二极管均具有高的探测效率(~1),其活性区面积为10—200毫米², 总X射线探测几率为$\sim 10^{-2}$. 这类探测器与放大器的电子学合在一起的能量分辨率 ΔE 是

$$\Delta E = (\Delta E_n^2 + 2.35^2 F \cdot E_{cx})^{\frac{1}{2}} \qquad (3.6\text{-}18)$$

式中最后一项是探测器活性层中电荷收集过程的统计性产生的. 如图3.6-16所示, E_{cx} 是X射线产生电子-空穴对所具有的平均激发能(对于Si是3.81电子伏,而Ge则是2.96电子伏). F 是法罗(Fano)因子(Si为0.12, Ge为0.08). ΔE_n 是探测器和前置放大器的噪声分布,其半宽度 FWHM 最好时可接近100电子伏. 图3.6-16的下半部示出半导体探测器收集X射线产生的电子-空穴对,经过低噪场效应管达到前置放大器,而这种场效应管又不时地为发光二极管(LED)所放空. 经主放大器信号正比于X射线能量并馈人 ADC 多道分析器或计算机. 探测器活性层(~3毫米厚)所吸收的X射线都会记录下来,硅的能区在1—30千电子伏及锗的能区在1—100千电子伏. 能谱的低能端与窗口和吸收体有关.

另外一种测量X射线的工具是晶体谱仪. 晶格平面间距离 d 的晶格布喇格反射能观察到相对于平面的入射角和出射角 θ 波长为 λ 的X射线,即

$$n \cdot \lambda = 2d \cdot \sin\theta \quad n = 1, 2, \cdots \qquad (3.6\text{-}19)$$

如果X射线能量是 $E = 1.24nm/\lambda$, (3.6-19)式的微分给出能量

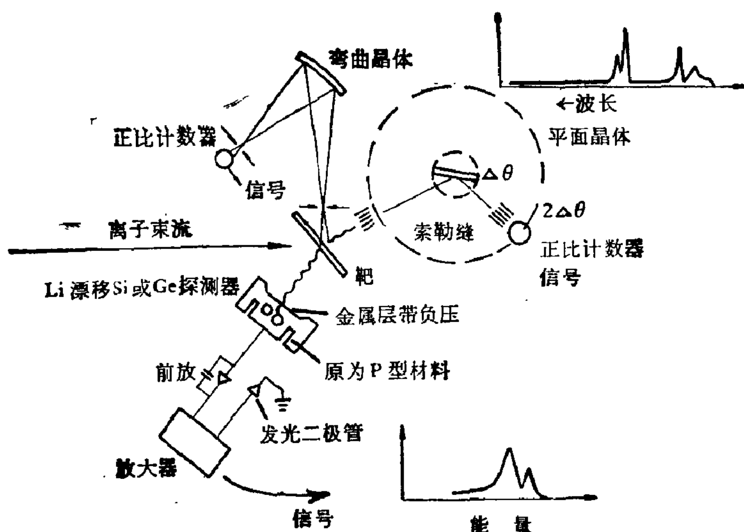


图 3.6-16 用于离子感生X射线的X射线探测器

分辨率

$$\Delta E = E \cdot \Delta\theta \cdot \cot\theta \tag{3.6-20}$$

$\Delta\theta$ 是由晶体的完整性和X射线进入晶体的角偏转确定的（$\Delta\theta \sim 0.10$）. 图 3.6-16 的右上方给出用平面晶体作实验的示意图. 索勒缝隙（Soller slits）限定了X射线打到晶体的 θ 和 $\Delta\theta$，以及一个装在对称位置的正比计数器记录反射光子，在这个计数器前端也放有一组索勒缝隙. d 固定则X射线的能量或波长 λ 由 θ 确定，改变晶体 $d\theta$ 或改变计数器(相当于 $2d\theta$) 则可改变 θ. 低能时由方程 (3.6-20) 所给出的能量分辨率比半导体探测器好得多，如图 3.6-17 所示. 不过，对一固定的谱仪位置只能测量一个能量而且由于反射损失和 $\Delta\theta$ 使探测效率很低 (10^{-5}—10^{-6}). 若用弯曲晶体作反射体后面这个局限性可以避免（如图 3.6-16 的上方）. 用弯曲晶体把X射线点源(实际是经过光栅)聚焦到正比计数器前面的一点，这样可把相对于平晶的有效立体角增大 1—2 个数量级. 实验的几何安排不变但可通过调节反射晶体和计数器而改变分析X射线能量.

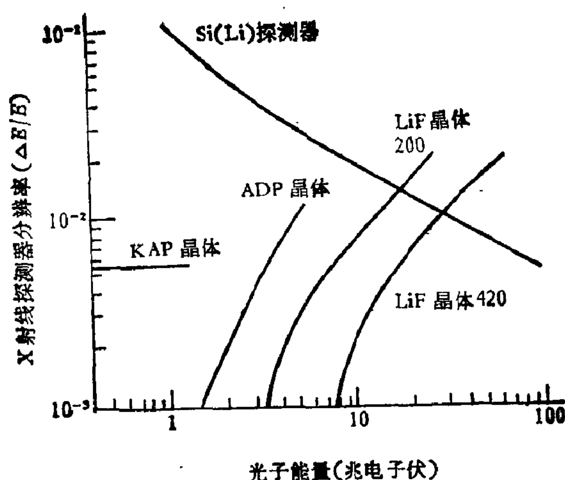


图 3.6-17 X射线探测器能量分辨率[30] LiF200:0.4028 纳米; LiF420:0.1802 纳米; ADP (Ammonium Dihyohogen Phosphate):1.064 KAP (Potasoium Acid Phthlate): 2.663 纳米

图 3.6-17 可以看出，探测低能X射线时晶体谱仪优越. 但是半导体探测器的效率最高，弯曲晶体的效率要低两个数量级，平面晶体更低. 半导体探测器可同时记录能量范围很宽的X射线，而波长色散的晶体位置固定在一个能量就只能测量谱中一点的强度，也即是说，对单元素灵敏. 如果用几个晶体，调到不同的元素，那么就可进行多元素分析.

四 本底辐射

离子感生X射线分析中的本底辐射主要来自以下几个方面：(i) 二次电子韧致辐射；(ii) 入射粒子的韧致辐射；(iii) γ 射线的康普顿散射；(iv) 辐射电子俘获；(v) 准分子跃迁辐射. 韧致辐射占本底的主要部分. 图 3.6-18 给出头三项本底辐射的机理示意图. 注意这些均是指半导体探测器中产生的.

一般情况下，在X射线低能处主要是二次电子韧致辐射，它一直延伸到一定的能量 T_m 时才迅速下降. 其产生过程分两步：首

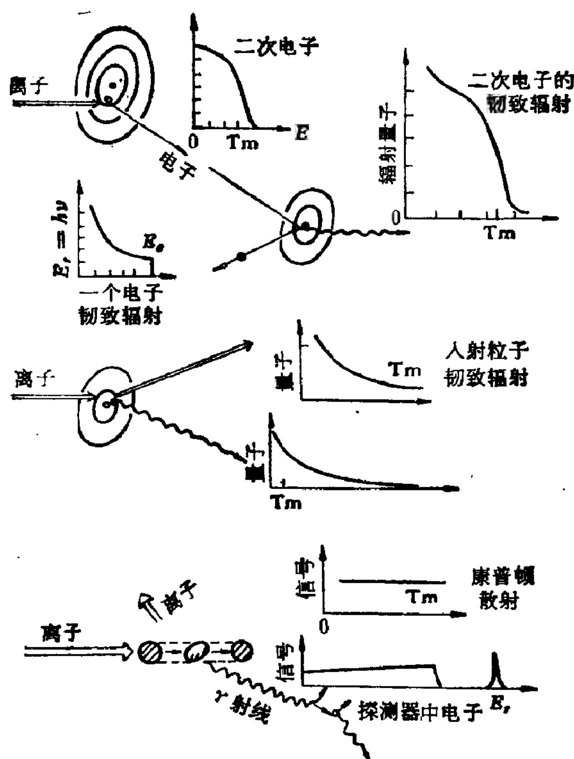


图 3.6-18 三项主要的本底辐射来源示意图： 二次电子韧致辐射(SEB)，入射粒子韧致辐射 (PB) 以及核 γ 射线的康普顿散射

先发射能量大于辐射能 E_r 的二次电子，然后这种电子在慢化的同时发射韧致辐射. 这里发射各种能量的电子是前面所讨论过的 BEA 和 PWBA 处理库仑电离的一部分. T_m 是转移给自由电子的最大能量，是由"对头碰"时的速度增量确定的. 在入射粒子-电子质量中心系统中该速度接近 v，所以，碰撞后实验室中电子速度接近 $2v$，因此，入射粒子传给自由电子的最大能量是

$$T_m=\frac{m}{2}(2v)^2=\frac{4m}{M}\frac{E_1}{A_1} \tag{3.6-21}$$

式中 $\frac{4m}{M}=2.18\times10^{-3}$. 能量高于 T_m 时，只有束缚电子作贡献并

且强度总是很弱. 从样品本体材料产生的二次电子也会产生连续的韧致辐射. 发射的二次电子在原子核库仑场中加速，放出韧致辐射量子，其能量范围可从零一直到电子的最大动能，而辐射几率可用二体碰撞近似（BEA）理论来计算. 图 3.6-19 是 3.0 兆电子伏质子打到碳和铝上理论计算和实验结果. 必须指出二次电子发射的韧致辐射同离子感生标识 X 射线(如图 3.6-2 中 K_α、K_β 等)有密切关系，发射二次电子而产生空穴是这个过程的第一步. 所以，(3.6-11) 式表达的入射粒子标度性质也适用于二次电子韧致辐射.

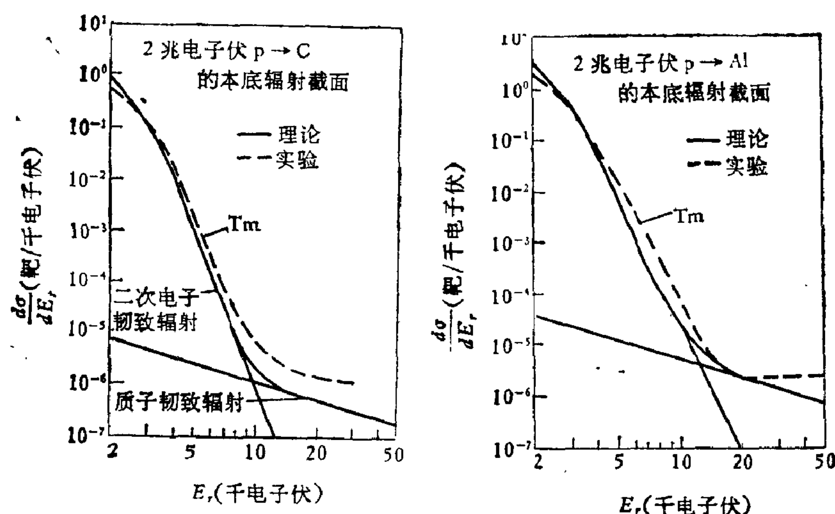


图 3.6-19　2.0 兆电子伏的质子轰击碳和铝靶的本底辐射截面[51].
实验(虚线)结果是采用半导体探测器 Si(Li) 进行的

图 3.6-18 还给出入射离子的原子核（如质子和重离子）在靶原子的核电场中加速而发射韧致辐射的情形，也叫做原子核-原子核韧致辐射（NNB). 这在入射粒子能量低时会出现，图 3.6-19 给出理论计算的结果. 一般情况下，偶极韧致辐射占统治地位，它取决于入射粒子和靶原子的电荷对质量比之差[51]，因此在接近对称碰撞系统中会趋于零. 这时四极辐射就会作贡献并同很小的偶极项干涉. 图 3.6-20 示出两个重离子碰撞系统的理论和实验结

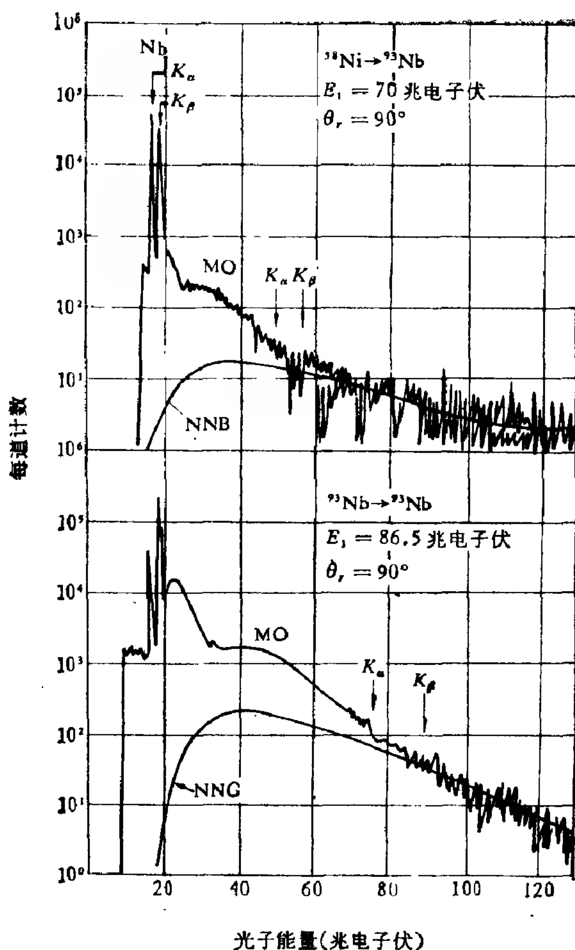


图 3.6-20 重离子碰撞产生的X射线，包括准分子辐射（MO）和入射粒子韧致辐射（NNB）．入射粒子为 1.21 兆电子伏/a.m.u. Ni 和 0.93 兆电子伏/a.m.u. Nb→Nb．实曲线为理论计算结果

果[52]．理论曲线是半经典计算的，与实验符合得非常好．

高能重离子碰撞中常常发射原子核 γ 射线，这些射线本身就在X射线区域，或者经过探测器物质中的康普顿散射，一部分能量给了电子，在X射线能区形成一个连续谱．图 3.6-18 给出这个过程的示意图．这经常是高能辐射区域本底的主要来源．计算其大小比较困难，但可对重要材料进行测量．

在重离子碰撞中，若形成分子轨道（MO）就会发生准分子辐射.（见本节的第二段），并且产生空穴的寿命比碰撞时间短，或者和它相当. 也即是，碰撞期间在瞬时形成的分子轨道中电子填充空穴发射的辐射带，其能量是核间距离的函数. K 轨道束缚最聚，合成原子在该距离（也即是最短距离）内的束缚能为 E_K，然后，由相互作用时间有限性所引起的动力学展宽（不确定原理），能量一直扩展到谱的中心（见图 3.6-20）.

另外，在高速重离子出现辐射电子俘获（REC），此时靶电子可跳到入射粒子内壳层空穴，从而可获得束缚能及相对于离子的平动能量 $\frac{1}{2}mv^2$. 因此，辐射中心 $\frac{T_m}{4}$ 比入射粒子束缚能高，也即是，略高于入射粒子标识 X 射线，其宽度由靶原子外层电子速度分布确定的. REC 宽度正比于靶电子的平均速度和入射粒子的速度. 对于较轻的离子 $Z_1 \sim 10—20$，REC 会出现尖峰，而对重离子或靶则是很宽的结构，逐渐过渡到准分子连续谱.

各种离子感生 X 射线的本底辐射中，二次电子韧致辐射和入射粒子韧致辐射是主要来源. 在高能下 γ 射线的康普顿散射也是一个重要因素，可用实验确定. 还有重离子碰撞下的准分子跃迁和辐射电子俘获. 由于这些本底辐射包含着不同的物理过程，故同测量标识 X 射线一样，测量各种本底辐射也可研究离子同固体相互作用机理，所提供的信息对前者是一个很好的补充和扩展.

五　PIXE 定量分析方法

(1) 薄靶

(i) 绝对测定法　使用薄靶样品（对于 2 兆电子伏质子，靶厚 ≤1 毫克/厘米^2）可忽略质子能量在靶中变化和 X 射线的增强效应和吸收效应，对于均匀束流，某一待测元素的重量 W（克）可写成

$$W = N^X A / [Q \cdot \sigma^X \cdot (\Omega/4\pi) \cdot \eta \cdot N_A] \qquad (3.6\text{-}22)$$

式中 N^X 为相应 X 射线标识峰的计数；A 为该元素的原子量；Q 每平方厘米面积上的质子数；σ^X 为 X 射线产生截面；Ω 为探测器所

张立体角；η 为探测系统效率；N_A 为阿伏伽德罗常数.

在X射线能谱中峰的计数 N^X 是把每个峰在一定范围内(一般取两倍半宽度)扣除本底(N_B)后积分得到的. 其判据为 $N^X > 3\sqrt{N_B}$. σ^X 可由公式(3.6-4)计算出，也可直接查文献[53]. 对薄靶样品，σ^X 可看作常数. 探测器效率在作绝对定量分析时需要加以精确测定.

汉恩逊 (Hanson)[54] 等人直接利用标准源来刻度探测器效率，配合模型研究方法给出探测效率为

$$\eta = \eta_g \eta_a f_a f_{Au} f_d f_e f_c \eta_s \tag{3.6-23}$$

式中 η_g 是与能量有关的几何因子；η_a 是半导体探测器活性区的本征效率；f_a, f_{Au} 和 f_d 分别是通过空气、铍窗、金和探测器前端死区的透射因子；f_e 是 Ge 或 Si K-X 射线逃逸的修正因子；f_c 是透过探测器表面上准直器进入环形灵敏区的透射修正；η_s 是电荷收集效率. (3.6-23)式中任一参数都可选用标准源发射不同能量光子经过一系列精密测量确定的. 所得到的效率曲线适用于半导体X射线探测器. 对本征锗探测器在能量范围 6—60 千电子伏范围内均很满意. 所用的标准源有：^{241}Am, ^{57}Co, ^{203}Hg, ^{22}Na, ^{137}Co, ^{54}Mn, ^{88}Y 和 ^{60}Co 等. 这些源刻度X射线探测器的能量范围可从100到1300千电子伏.

另一种方法则是用最小二乘法来刻度大的平面或同轴 Ge(Li) 探测器(能量大于150千电子伏)的效率，即选择一个分析函数来拟合实验测量结果.函数中的参数有的与探测器的物理性质(如灵敏层深度)有关，多数没有实际的物理含义. 不过，由于汉恩逊方法建立在对探测器各参数精密测量基础上，经常非常麻烦，所以最小二乘法拟合函数的办法也常采用.

确定 Si(Li) 探测器(能量在 5—30 千电子伏)效率曲线所用的函数是

$$\eta = \eta_g f_{Be} f_{Au} f_{Si} f_g (1 - f_{cr}) \tag{3.6-24}$$

式中 f_{Be}, f_{Au} 和 f_{Si} 分别是通过铍窗、金电极和平面硅透射率；f_{cr} 是逃出晶体的X射线分数；f_g 是几何因子(修正环形死区的损

失). 参数 f_{Au}、f_{Si} 和 f_g 是可调的，以便拟合后的参数值使 χ^2 最小. 图 3.6-21(a) 和 (b) 分别给出 Ge(Li) 和 Si(Li) 探测器效率的实验拟合曲线.

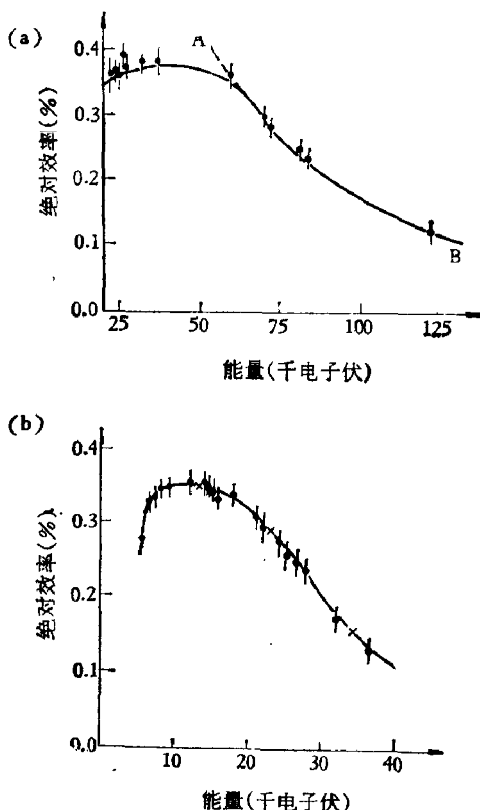


图 3.6-21 半导体X射线探测器效率(全能量加上逃逸峰) (a) Ge(Li) 探测器，(b) Si(Li) 探测器，其中 (a) 图的A到B部是用指数函数拟合. (b) 中的实验点是用 X/γ 比法确定的. ×号是 NaI(Tl) 刻度的. 曲线是拟合结果[55]

(ii) 相对测定法　相对测定法是在相同条件下，分别测量标准和样品中待测元素的标识X射线强度，这样可避免 Ω，η 等因子中的系统误差和 σ^X 的不确定性.

若把特征峰面积 (N^X) 对入射粒子总数 Q 归一化，则待测元素在样品中的含量 W_x 可用下面的简单关系式来表示:

$$W_x = \frac{N_x^x}{N_s^x} W_s \tag{3.6-25}$$

下标 s 和 x 分别表示标准和待测样品.

(iii) 单标准测量法　以单个标准来标定其它多种元素，在应用中是比较方便的. 由方程 (3.6-22) 可知，原子序数 Z 的元素含量为

$$W_z = \frac{N_z^X}{N_s^X} \cdot \frac{A_z \eta_s \sigma_s^X}{A_s \eta_z \sigma_z^X} W_s \tag{3.6-26}$$

式中脚标 s 和 z 分别表示单标准元素和待测元素.

引入相对灵敏度 S_Z:

$$S_Z = \frac{A_s}{A_z} \frac{\sigma_z^X \eta_z}{\sigma_s^X \eta_s} \tag{3.6-27}$$

这样 (3.6-26) 式可简化为:

$$W_Z = \frac{N_z^X}{N_s^X} \cdot \frac{W_s}{S_Z} \tag{3.6-28}$$

显然 S_Z 是具体实验参数的函数，在以 6 兆电子伏的质子激发，Si(Li) 探测器灵敏区厚 3 毫米，吸收体 1 毫米聚乙烯的情况下，以铜为标准的相对灵敏度曲线示于图 3.6-22(a)，以 1.2 兆电子伏质子激发，以钙为单标准的 S_Z 曲线见图 3.6-22(b).

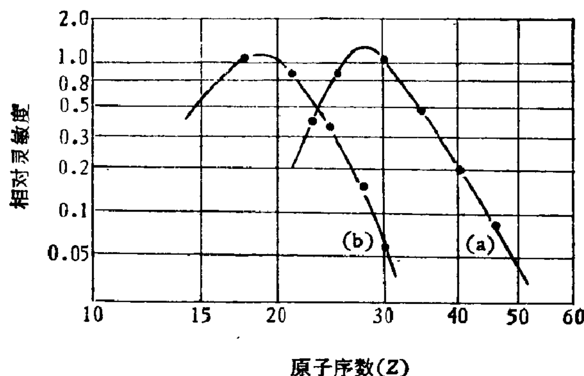


图 3.6-22　相对灵敏度 (S_Z) 曲线[56].

(a) $E_p = 6$ 兆电子伏 1 毫米聚乙烯吸收片;

(b) $E_p = 1.2$ 兆电子伏 11 毫克/厘米^{2}涤纶薄膜吸收片

采用单标准测定时，不必知道流强和探测器所张的立体角，但其测定误差显然比相对法要大，这主要取决于 σ^X，η 等因子的误差和特征 X 射线峰面积（N^X）的测量误差. 通常由上述半经验公式（3.6-4）所计算得到的 σ^X 有不到 10% 的误差，探测效率和吸收校正的误差约 10～15%，标识 X 射线峰的面积（N^X）的误差随测定的水平而变化（$\sqrt{N^X}/N^X$），在接近探测限的情况下，后者成为主要的误差来源. 通常单标准法的测定误差约在 15% 左右.

（2）厚靶

（i）一般情况 对于天然样品、厚的组织切片以及固体物质的分析，都要涉及厚靶样品. 这就需要考虑质子能量在靶中的递降，以及基体对特征 X 射线的吸收和增强效应.

实验布置如图 3.6-23(a) 的均匀厚样品可分为 n 层厚度为 Δx（或 $\Delta\rho x$）的薄层[图 3.6-23(b)].

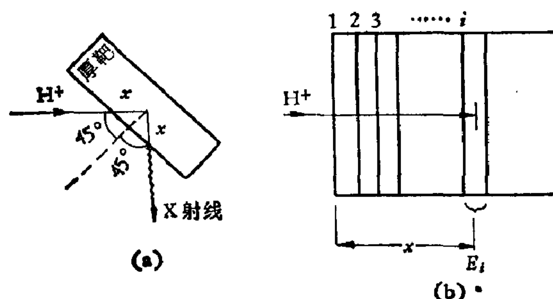


图 3.6-23 厚靶样品示意图

在 Δx 内质子束能量可视为常数，对这些相应薄层产额进行数值积分，即可得到厚靶的总产额贡献.

待测元素标识 X 射线峰的计数 N^X 为

$$N^X = \frac{QN_A(\Omega/4\pi)\eta C^X}{A} \cdot \sum_{i=1}^{n} \sigma^X(E_i)\exp\left(-\frac{\mu'}{\rho}\cdot\rho x_i\right)\Delta\rho x \qquad (3.6\text{-}29)$$

式中 $\frac{C^X N_A}{A}\cdot\Delta\rho x$ 为薄层中待测元素的原子数；C^X 为待测元素的相对含量；ρ 为样品的密度；μ' 为吸收系数. 距表面 x 处的自吸收因子用 $\exp\left(-\frac{\mu'}{\rho}\cdot\rho x\right)$ 表示；$\frac{\mu'}{\rho}$ 为对应特征X射线的质量吸收系数. $\sigma^X(E_i)$ 为能量 E_i 的标识X射线产生截面，由(3.6-4)式计算得到. 厚靶产额便可方便地由小型电子计算机计算得到.

一般计算中需知道靶样的基体组成，但可以通过重复迭代过程来考虑所有元素 $\frac{dE}{dx}$ 和 μ'/ρ 的结果，此情形类似于§3.1计算厚靶背散射谱.

增强效应对 PIXE 而言一般是较小的，可以忽略[59]. 但在特殊情况下，例如对铁基体中铬的测定，增强效应可达百分之几十，应予以校正.

(ii) 有效深度　对于厚靶样品的 PIXE 分析，由于质子较低的穿透本领，以及对标识X射线的吸收效应，探测到的X射线主要来自样品的表层.

我们可以把发射占产额75% X射线的样品厚度称为有效深度. 由公式(3.6-29)求得在一定质子能量和基体情况下的各待测元素相应的有效深度.

在轻基体中观察重元素时，有效深度主要取决于X射线的产生位置. 而在观察轻元素时，则主要取决于对标识X射线的吸收情况.

计算表明[56]，对于 PIXE 在某一样品的基体中，有效深度随待测元素的原子序数变化很小，这意味着不同特征X射线几乎都是从相同的平均有效深度中发射的. 这对研究各元素的相对丰度是较为方便的. 另外，对某一指定的待测元素，在不同样品基体中有效深度的变化也较小，这样在以质子探针作元素分布的研究中，被分析层的厚度就不会因样品成分变化而有很大波动.

以上说明，并不是一定要靶样很厚才属于厚靶分析. 另外，相

对于整个样品，PIXE 方法总是涉及很薄的表面层.

(iii) 低 Z 基体中少量重元素的测定　若厚靶基体具有低的平均 Z 值，则对重元素 K X 射线的吸收是很小的，因此在积分中吸收指数项可以不必考虑. 当 $E_p \geqslant 1$ 兆电子伏时，我们得到一个很简单的厚靶相对测定关系式

$$\frac{N_x^X}{N_s^X} = \frac{C_x^X \cdot R_x}{C_s^X \cdot R_s} \qquad (3.6\text{-}30)$$

R 为入射粒子在该样品中的全射程，下标 x、s 分别表示样品和标准样品. 这个关系式不仅非常简单，而且在选择标准时，原则上不受什么限制. 这种简化情况在实际应用中是常见的，例如生物样品，半导体硅样品等. 原先认为很复杂的厚靶样品分析问题，其中大多数都能用简单的相对测定来解决.

(3) 干扰问题

由于 Si(Li) 探测器分辨率的限制，以及X射线能谱的复杂性，难免会产生X谱线的干扰问题. 对过渡元素，元素 Z 的 K_α-X 射线峰会重叠在元素 $(Z-1)$ 的 K_β 谱线上，这需要通过 K_β/K_α 分支比值进行校正.

在低能区，含量相差悬殊的相邻元素的谱线也会产生峰部分重叠的现象. 通过电子计算机处理，可分解重叠峰. 另外，$Z \geqslant 35$ 的较重元素的 L-X 射线与较轻元素的 K-X 射线之间的干扰也必须考虑，如 Ba L_{α_1} 和 Ti K_{α_1} 谱线之间仅差 45 电子伏，SK_α、Mo L_{α_1} 和 Pb M_{α_1} 之间分别仅差 15 和 38 电子伏. 对于这种情况则需要分析其它伴生的标识X射线（例如 K_β 或 L_β），借助谱线的相对强度予以澄清.

(4) 过滤片

分析X射线使用过滤片的目的：(i) 防止从靶体产生X射线使探测器饱和；(ii) 阻止背散射离子和出射电子打到 Si(Li) 窗；(iii) 消除硅基体X射线本底，提高探测微量元素的灵敏度. 图

3.6-24 给出 3MeV $^4He^+$ 离子轰击 Si (As) 的X射线谱：(a) 未加过滤器，(b) 加上 Al 和 Mg 过滤器[1]. 在图[3.6-24(a)]中，由于没有X射线过滤片，三个重叠的谱使得 Si K-X 射线的峰值达到 120,000 计数/道，而砷的标识X射线(即 As L-X 射线)应在图中所示箭头位置但根本看不见。 当加上 15 微米厚的铝和 4 微米厚的镁过滤片时，情况有了很大的变化，铝片可完全消除 Si(K) X 射线，但出现了 Al (K) X 射线把 As (L) X 射线峰吞没. 加上镁片后则可把 Al (K) X 射线减小两个数量级，这时虽然也出现 Mg

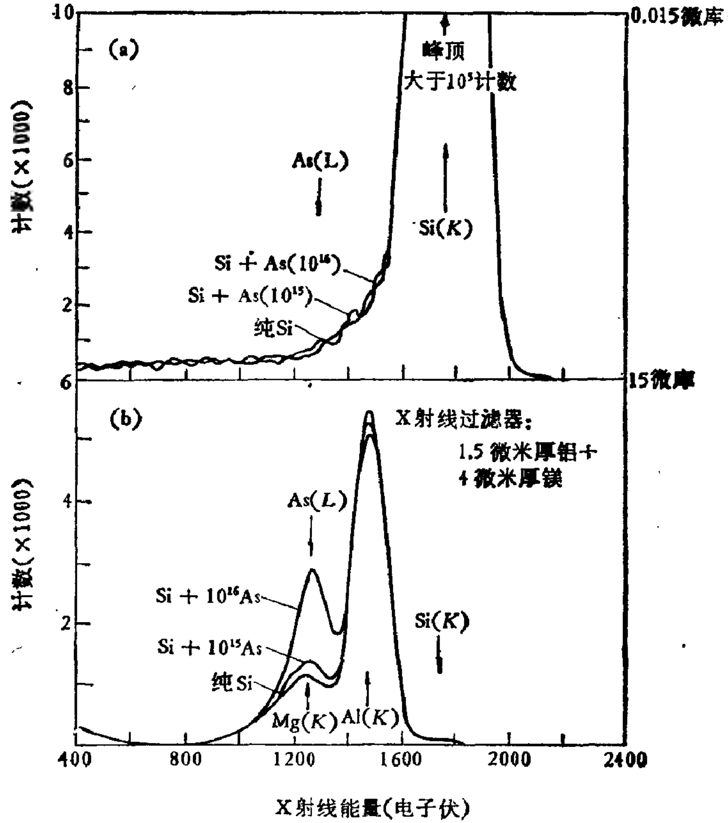


图 3.6-24　3 兆电子伏 $^4He^+$ 轰击 Si(As) 产生三种叠加的X射线谱：
(a) 没有加X射线过滤片；
(b) 加 15 微米 Al 和 4 微米 Mg 片后的X射线谱[1]

(K) X 射线，但 As (L) X 射线标识峰却突出起来，分析就很方便了.

六 PIXE 分析特点及应用

综上所述，PIXE 分析特点如下：(i) 元素鉴定一般 $z \gtrsim 12$；(ii) 能分析含量少浓度低的杂质元素；(iii) 一次测量可探知多种元素；(iv) 灵敏度随原子数平滑变化；(v) 可用微束；(vi) 非破坏性分析；(vii) 可进行定量和绝对标定；(viii) 快速分析；(ix) 适于常规也能用于探索性的分析并可同其它方法配合使用. 这些特点使 PIXE 作为微量分析手段已应用到各个科学研究领域中去.

(1) 环境污染的检测

在环境保护中需对大量的空气、水质、土壤、生物样品进行多元素分析. PIXE 适应这种需要，已发展成为一种常规的检测方法.

(i) 水质样品的分析　在 100 毫升经过悬浮物离心分离的河水样品内，加入适量的铜试剂 (DDTC)，加压过滤，使待测微量元

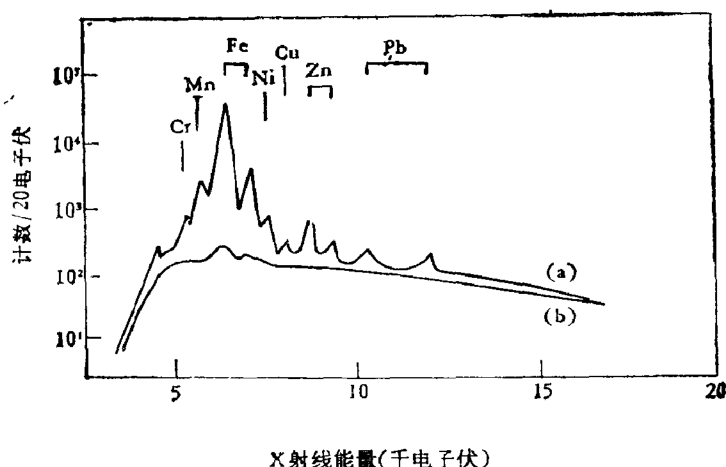


图 3.6-25　河水样品的 PIXE 能谱：(a) 河水样品；(b) 纯水

素浓缩沉淀于醋酸纤维过滤膜上(直径 15 毫米),即制成待测薄靶样品。对铜、锌、铅和镉的沉淀回收率均在 80% 左右。样品的浓缩过程也是靶样的制备过程,这样制备的靶样可满足薄靶的要求,能承受几十毫微安的质子轰击几十分钟。 图 3.6-25 是河水样品的X射线能谱。表 3.6-1 给出 PIXE 测定水质中含 Cu, Zn, Pb 等微量元素。

表 3.6-1 水质样品的分析结果

含量 ppb / 元素 / 样品	Ni	Cu	Zn	Pb	Fe	Mn*)	Cr*)	Ti*)
1		1.0	1.4	1.5	50			
2	0.7	7.0	12		475		1.9	8.0
3	15	8	100	9.8	1.6×10^{5}	230		

*) 表示该元素未测回收率,故是半定量的.

中国科学院大气物理研究所同美国、瑞典有关学校合作研究北京城郊大气污染情况[57]. 由于北京天冷季节, 几百万人烧煤取暖, 因此大气中主要是煤燃烧的尘埃. 而西欧北美许多城市空气污染主要是石油及冶金灰尘. 样品选取离北京市区 110 公里的新龙地区。气溶胶取样器放在离地面 15 米高的楼顶上,时间为 1980 年 3 月 9 日至 16 日. 样品分两类: "条状"样品,由时间顺序过滤取样器将空气以 0.7 升/分的流量通过面积为 10 毫米^2 孔径大小为 0.4 微米的纳克利浦 (Nuclepore) 带制成; "冲击"样品是用冲击器 (impactor) 取得的。 不过在 20 厘米^2 锥形开口上盖有穿孔的风屏以减低风速.

条状样品的 PIXE 分析是 5 兆电子伏质子轰击,束流 20 毫微安通过 2 毫米 × 5 毫米 (0.10 厘米^2) 的矩形准直孔, 每个样品质子电荷收集量为 2.5 微库. 每个样品相当于气溶胶取样时间 4 小时,吸收空气体积为 0.17 米^3, 质子束均匀射到靶上并在 PIXE 分

析时是连续的. 通过一个 500 微米的 Mylar (密拉聚脂薄膜)吸收体,其上有一个小孔约为 Si(Li) 探测器表面积的 4.75%. 重于 Na 的元素要用计算机程序从谱中解出,探测器极限分辨是: S 为 10 毫微克, Fe 为 2 毫微克, Pb 为 5 毫微克. 在探测极限以上的还有 Al, Si, S, Cl, Ca, V 和 Fe 等少量元素.

PIXE 分析"冲击"样品是用 2.5 兆电子伏质子轰击的. 束流为 50—100 毫微安, 通过 0.53 厘米^2 的圆形准直孔及质子收集电荷为 20 微库. 在X射线脉冲进入数字获取系统期间质子束流偏离靶位置,以减少脉冲堆集和样品被束流加热. X射线经过 75 微米厚的密拉 (Mylar) 薄膜(没有孔)后探测记录下来,重于磷的元素用计算机程序从谱中分析解出. 探测极限硫约为 10 毫微克,铁是 0.2 毫微克和铝是 1 毫微克 (1×10^{-9} 克). 在探测极限以上还找到硫、氯、钾、钙、锰、铁、锌和砷(在镀层的密拉样品上), 在纳克利浦冲击过滤样品 (Nuclepore impactor filter)上有硫、氯、钾、钙、铬、锰、铁、砷和溴等.

通过 PIXE 分析得出各种元素含量随时间的变化, 如图 3.6-26. 实验是代表每 4 小时的平均值. 图 3.6-26(a) 还表示出气候条件,包括风向,给出两种样品的相似性和区别. 冲击样品中的钙和铁浓度一般比条状样品为高.两种元素均发生在大于 2微 MAD 分数,其差别主要是由于冲击器对粗粒子取样效率高,而条状器 (streaker) 能去掉粗的粒子. 加上冲击器装有风屏增强取样效率. 钾和锌主要是细粒子, 因此冲击器和条状样品浓度符合较好. 而硫元素除了 3 月 13 日—14 日条状样品中浓度高外, 其它时间两者符合较好. 氯元素浓度两者符合差, 3 月 11 日—13 日和 15—16 日期间条状样品中的浓度低很多, 而在 13—14 日期间又高于冲击样品. 由于前者同硫浓度最大时间相吻合, 说明是受到北京城传来大气污染的影响, 条形器样品中氯浓度低表明在取样时同酸性污染物发生化学反应而放出 HCl, 而且这种情况在空气经过过滤取样器比冲击取样器时严重.

图 3.6-27 给出冲击器样品中 4 种元素的浓度分布同粒子大

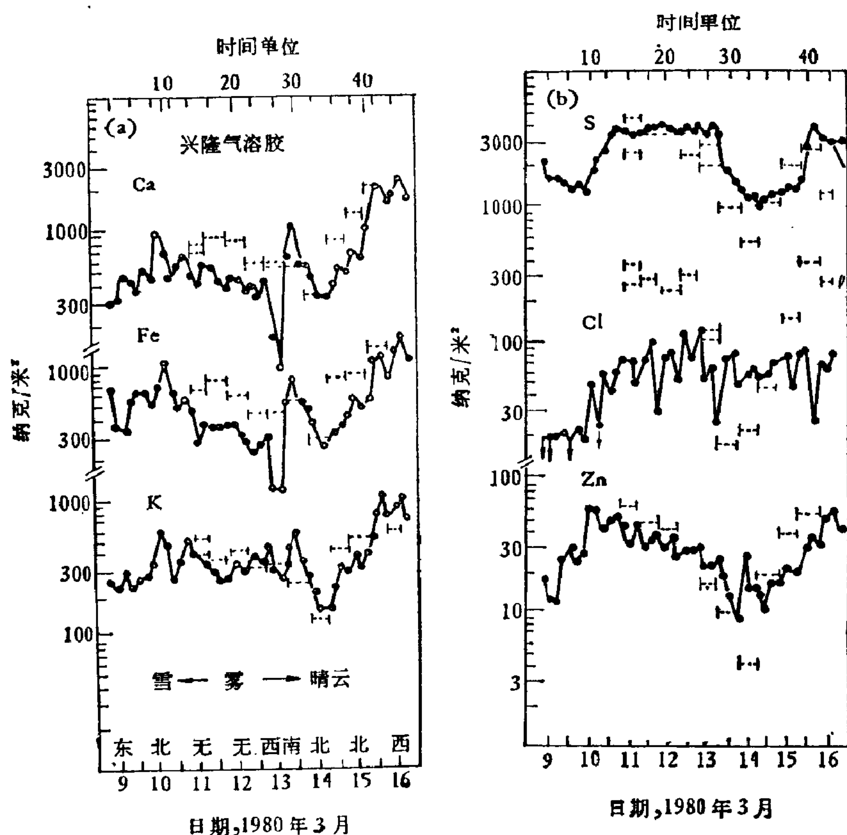


图 3.6-26　PIXE 分析气溶胶样品中各元素浓度随时间的变化（●—●表示每 4 小时作平均，|……| 级联冲击取和。[55]（a）Ca，Fe 和 K，（b）S，Cl 和 Zn．并给出气候条件，包括风向

小的关系．取样时间是在小雪之后，取样开始时风向由无风转西南风，以后均是东风转北风且有雾，这样北京上空的大气污染物定会传到取样地点．钙主要是在 2—4 和 4—8 微 MAD 分数中，样品重复性很好，来源于大气组分中的灰尘．硫和氯在 0.5—1 和 1—2 微 MAD 中，重复性不好，主要受北京市区大气污染，特别是烧煤的影响．钾颗粒大小分布处于钙和硫氯之间．粗粒重复性好而细粒重复性不好．所以钾是受大气组分和北京城市大气污染两种来源影响的．同北京城比较清洁时期空气颗粒相比较，可以认

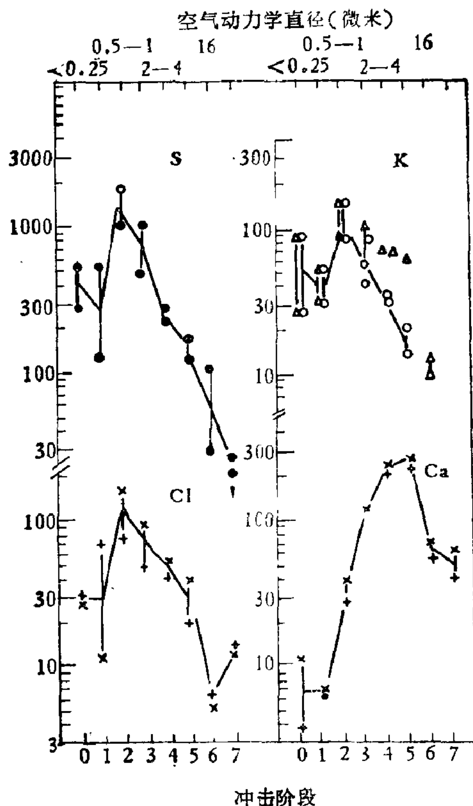


图 3.6-27 冲击样品中硫、氯、钾和钙的分布(两个样品分别取自 1980 年 3 月 11 日新龙地区 10 小时 15 分和 19 小时15分)[57]. 冲击器阶段 0—7 相当于空气动力学直径的范围(微 MAD)(即它等于取样速度是 1.0 升/分单位密度直径)

为钾的粗粒部分尺寸分布类似于钙. 减去后就得到钾纯细粒分布. 图 3.6-27 已经给出了这个结果,即粗粒分布中 K/Ca 之比等于 8—16 微 MAD 分数中测量的值. 因此,钾的细粒分布是细粒分数中测得的浓度和与钾类似的粗粒分布中细粒尾部所假定的浓度之差. 钾的细粒分布记为 K_F 同硫和氯的分布非常相似,故也是由于北京城里燃烧煤引起的污染.

为了比较煤燃烧产生的气溶胶和未烧煤的组分之差别,对新

龙地区煤进行了中子活化分析(NAA)和离子感生X射线(PIXE)测量分析比较. 中子活化分析用归一 Mn 来标定绝对浓度并对 PIXE 分析中的X射线自吸收加以修正,结果示于表 3.6-2. 在中子活化分析中浓度上限为 S < 4000, Cu < 100, Br < 100, Sr < 250, In < 0.1, I < 10, 及 Ba < 140. 同气溶胶的结果对照,发现在 0.5—2 微 MAD 细粒分布中, K, Mn, Ni, Cu, Zn, As, Pb, Se 和 Br 都较纯新龙本地的煤中含量高.

表 3.6-2 新龙煤的 PIXE 和 NAA 分析比较*)

元　素	Na	Al	Si	S	Cl	K	Ca		
PIXE		4006	19332	930	89	28	560		
NAA	56	3824					623		
元　素	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Cu	Zn		
PIXE	648	7.1	2.3	597	11106	10.3	2.6		
NAA	875	2.9		597					
元　素	Ni	Ga	As	Pb	Bi	Se	Br	Rb	Sr
PIXE	<0.5	<1.5	<3.5	<11	<8.5	<2.0	<2.5	<4.0	<8.5

*) 元素浓度(p.p.m.).

(2) 生物和医学样品分析

离子感生X射线发射 (PIXE) 同其它分析方法[如原子吸收光谱分析 (AAS)] 配合起来,能对生物样品(如人发)中的微量元素进行定量分析. 人发的分析可以提供人体内部疾病情况的信息. 原子吸收谱分析是一种破坏性而又费时的方法, 但容易探测某些元素(如锌). 有的元素(如砷)很难探测并且样品量很大. PIXE 则是比较理想的方法,但定量结果难. 把两者结合起来分析从事 GaAs 工作人员的头发中微量元素则可精确地定出其中含砷量. 步骤如下: 先用 PIXE 技术对每个工人少量头发进行快速非破坏性分析, 然后再用原子吸收谱 (AAS) 对这些样品中的锌(Zn) 进行分析. 从 PIXE 得到的 As/Zn 比率,就可定量知道砷的含量. 图 3.6-28 是含有砷元素头发的 PIXE 谱[58]. 从 As 和

Zn 峰的纯计数中计算头发样品中的砷含量. 计算时考虑的因素有：(i) 由于头发直径约 70 微米，大于 1.9 兆电子伏质子的射程（～40 微米），故可把头发看成厚靶；(ii) 假定一根头发含有许多层，每一层厚度为 0.725 微米. 由于每层中 PIXE 截面近似一个常数，所以每层可以看成是薄靶；(iii) 头发的百分之九十是轻元素构成，故可忽略出射 X 射线的吸收. 表 3.6-3 给出 PIXE 的一些分析结果并同 AAS 结果相比较. 进一步实验表明砷含量同工作人员与 GaAs 接触的时间长短密切相关. 一旦停止同 GaAs 接触，其头发的砷含量也逐渐减少.

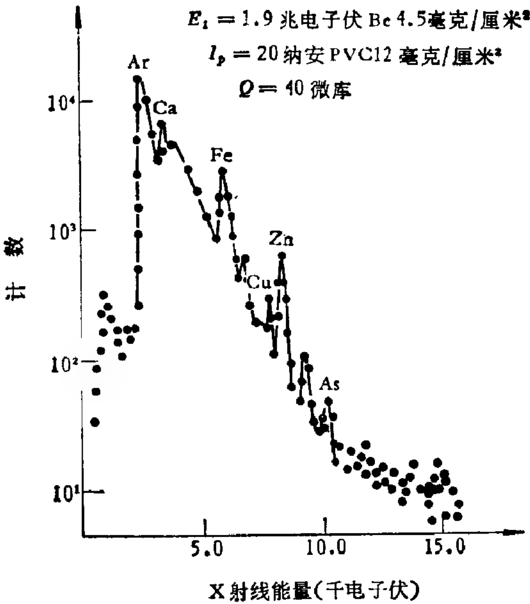
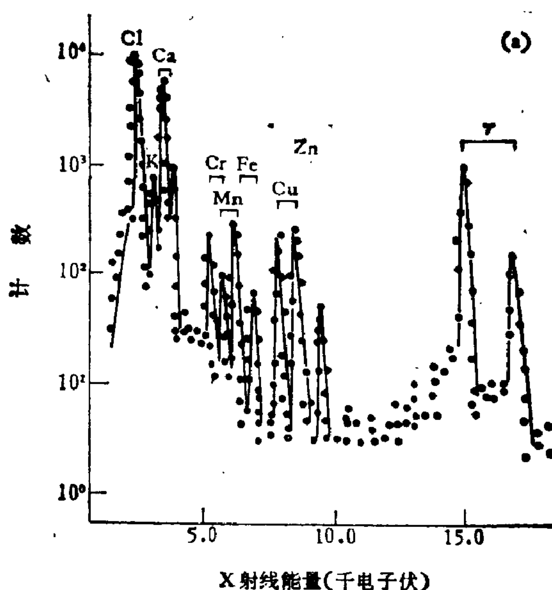


图 3.6-28 头发中含有砷的 PIXE 谱[56]. 入射能量 E_1 = 1.9 兆电子伏，Be 是 4.5 毫克/厘米²，I_p=20 纳安，PVC 是 12 毫克/厘米²，Q=40 微库

图 3.6-29(a) 和 (b) 分别是正常儿童和智力上有缺陷儿童头发的 PIXE 谱. 22 个智力上有缺陷的 10 岁儿童和 23 个同样年龄的正常儿童的分析结果来看，后者头发中 Cu/Zn 比率是前者



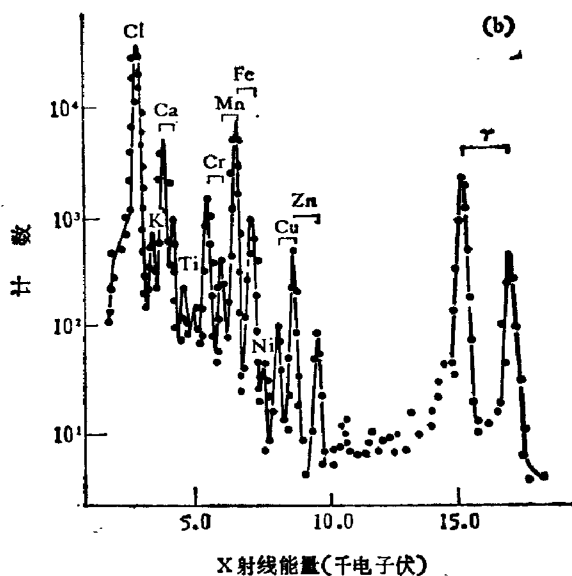


图 3.6-29 儿童头发的 PIXE 谱: (a) 正常发育的; (b) 智力有缺陷的. 测量条件: 质子能量 1.48 兆电子伏, 束流强度 30 纳安, 电荷 Q 是 40 微库, 吸收体有 4.5 毫米/厘米^2 的铍、3.7 毫克/厘米^2 的铝和 3.6 毫克/厘米^2 的 PVC, 探测器在 5.9 千电子伏时的分辨率为 185 电子伏, 是 80 毫米^2×3 毫米厚的 Si(Li)[56]

表 3.6-3　一些操作人员头发中砷含量

样品编号	AAS (ppm) Zn	AAS (ppm) As	PIXE(ppm) As
1	112.9	13.5	12.4±1.4
2	122.8	4	5.7±1.5
3	148.7	7	11.0±2.6

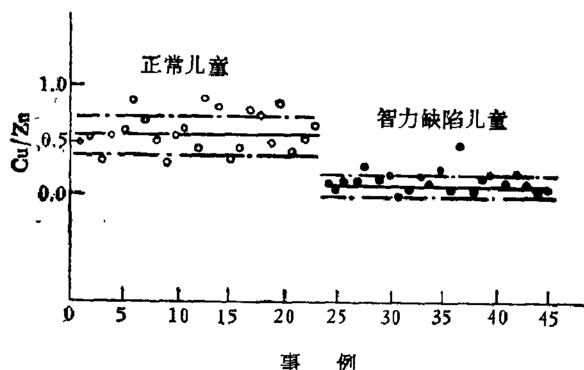


图 3.6-30　发育正常和智力缺陷儿童头发中 Cu/Zn 比的比较[56]

的五倍(见图 3.6-30). 其它差别也很明显,例如,智力缺陷儿童头发中铁的含量要大得多. 这些信息对医学上诊断缺陷来源很有帮助.

(3) 考古研究[56]

越王勾践剑是我国最珍贵的古剑之一. 它虽在地下埋藏了 2500 多年，仍然花纹清晰，剑身光泽，剑刃锋利. 为了确切了解我国古代劳动人民的卓越冶炼技术和铸剑工艺，中国科学院上海原子核科学技术研究所，复旦大学和北京钢铁学院协作，采用外束技术，对越王勾践剑等珍贵文物进行了无损的 PIXE 分析. 将 2.2 兆电子伏质子束，通过 0.5 毫米准直孔和 7 微米厚的铝窗引出真空管道，经过 15 毫米左右的大气，以 2 毫米直径的束流靶点照射宝剑的花纹、剑脊、剑刃和剑格上的装饰品等各部位，进行表面分析

(有效深度为 3 微米)。采用 3—5 毫微安的束流，每个部位分析时间仅需十分钟。

图 3.6-31 是越王勾践剑剑格的 PIXE 能谱. 剑表面用锡青

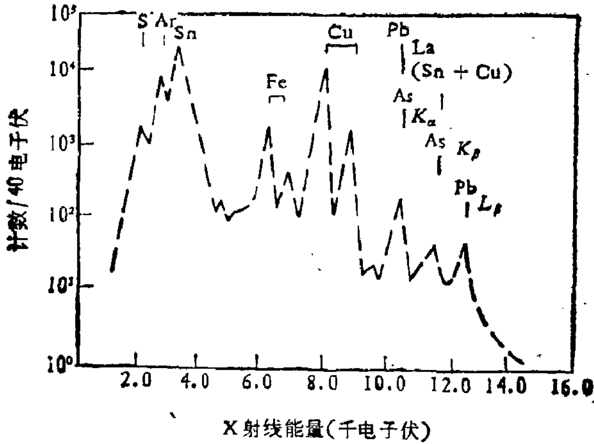


图 3.6-31 越王勾践剑剑格 PIXE 能谱[?]

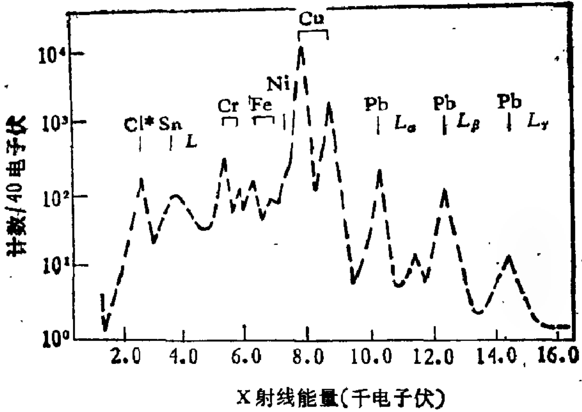


图 3.6-32 秦皇箭镞的 PIXE 能谱. 带*号的谱线 Cl* 峰系加聚乙烯吸收片

铜铸成；剑脊和剑刃成分相同，含铜 80% 左右，含锡约 20%，这与当时的一般青铜剑不同之处在于含铅较少，小于 1%. 另外对剑基体作无损X 荧光分析 (分析有效深度约 10 微米) 时发现有少量

的镍，这对勾践剑防腐防锈肯定有利. 分析显示，在灰黑色菱形花纹及黑色的剑柄、剑格中均含有硫. 初步认为，当时可能使用硫或硫化物涂于表面而生长黑色硫化亚铜这样的表面处理工艺.

由秦陶俑坑箭镞及铜箭测得的 PIXE 能谱（如图 3.6-32）表明其表面有铬，而断面没有铬. 说明秦代铜器是通过铬盐进行表面处理，使表面生成致密的氧化铜锡. 这与勾践剑的表面处理工艺不同. 对春秋残剑的表面分析也确认其无铬，说明用铬盐作表面处理是从秦代开始的，清楚地显示了随着生产力的发展，铜器表面处理工艺的演变情况.

勾践剑的剑格一面嵌有三块蓝色透明的装饰品，分析表面（图 3.6-33），它是透明的纯度较高的硅酸钠、钾、钙玻璃，并在熔化时用铜离子着色. 由于铜不存在于石英和其它原料中，应该把氧化铜作为着色剂加入的. 这是经科学鉴定的我国最古老的玻璃制品.

这一研究，使二千五百多年前劳动人民创造的卓越工艺得到进一步阐明，为我国文物和冶金史研究工作提供了新的研究方法和宝贵资料.

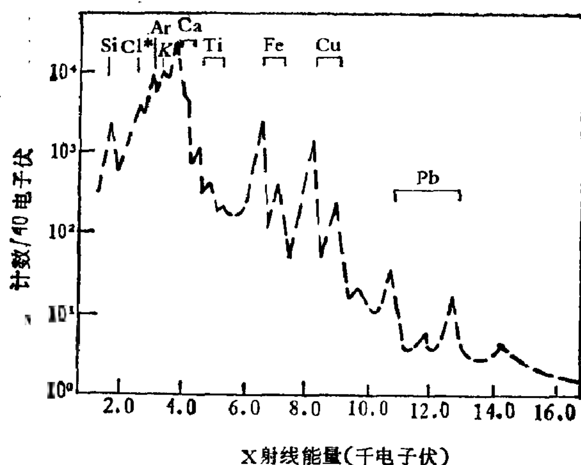


图 3.6-33 勾践剑上琉璃制品的 PIXE 能谱[56]

(4) 超重元素的探索[59]

随着离子感X射线 (PIXE) 实验技术的发展，减小本底，测量角分布等，应用范围愈来愈广. 甚至在探索利用 PIXE 证实超重核的存在. 最近，人们发现在云母矿中有微小的独居石 (monazite) 包裹体，被巨光环包围，这是为放射性原子核 α 粒子辐射损伤的结果. 若干光环 (halos) 很大，人们认为可能在这些包裹体中存在着未知的元素. 用 4.5 和 4.7 兆电子伏聚焦质子束(直径为 30 微米)产生X射线来分析这类样品获得十分重要的信息. 图 3.6-34 是从正常的 Th/U 包裹体和具有巨光环的包裹体的 PIXE 谱[58]. 可看出两者组分大致相同，主要是稀土元素的 K-X 射线

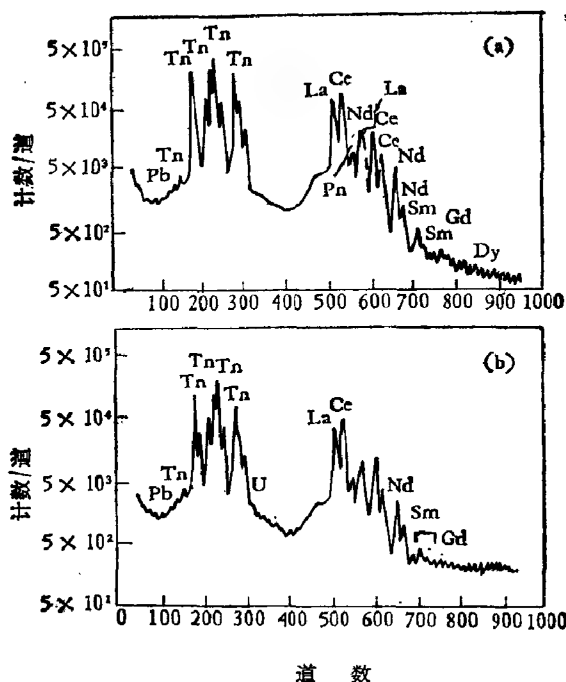


图 3.6-34 5.7 兆电子伏质子轰击独居石 (monazite) 包裹体的 X 射线谱: (a) 具有正常的 Th/U 光环样品; (b) 具有巨光环样品[58]. 中间下沉部分的区别可见图 3.6-32

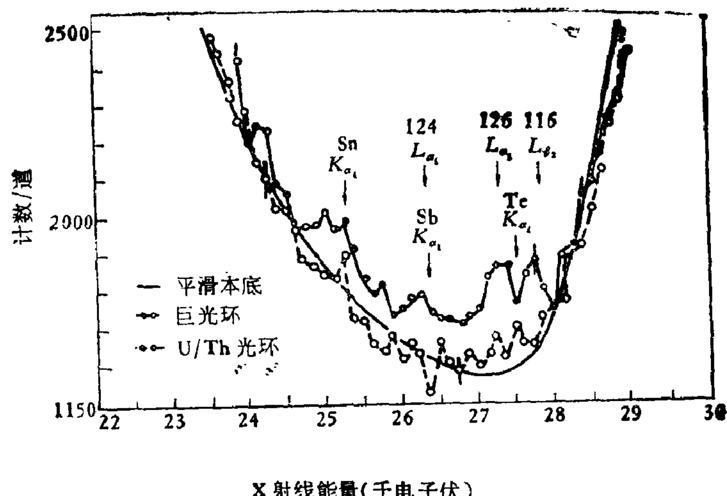


图 3.6-35 如图 3.6-34 中间下沉部分的精细结构[59]. 图中标出巨光环包裹体各小峰对应的超重元素发射X射线能量位置

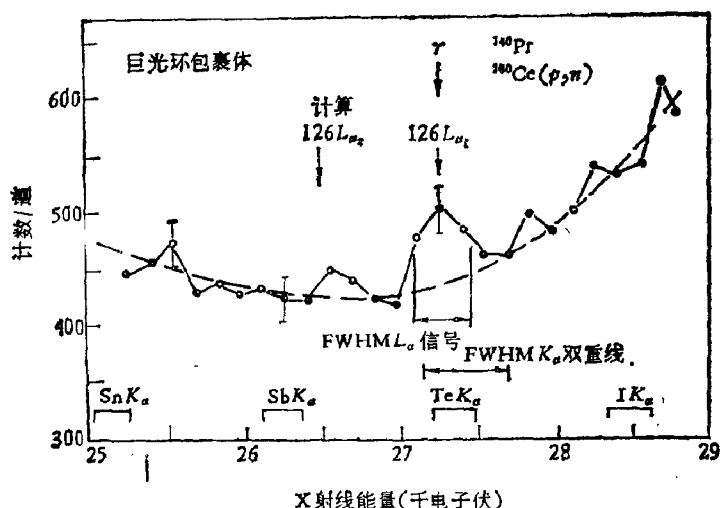


图3.6-36 4.7 兆电子伏质子轰击巨光环样品得到X射线谱的中心部分[59]

和 Th, U 来的 L-X 射线. 在高能区，巨光环包裹体的本底较高. 两组谱线中间均有一个下沉. 图 3.6-35 给出两者下沉部分的精细结构. 小的峰只在“巨光环”包裹体谱中出现，其位置相应

于 $Z=126$, 124 和 116 超重元素原子 L-X 射线的计算值. 图 3.6-36 给出另一个巨光环包裹体能量在 25 千电子伏至 29 千电子伏区间的X射线谱，在 27.23 千电子伏处有一个对应于 $Z=126$ 的 L_{α_1} 的谱峰. 此峰很接近 Te 的 K-X 射线，不过中心位置有移动，并且 Te 的 K-X 谱线由于是没有分辨的双峰在一起，很宽. 而实际观察到的峰宽较窄. 在 27.23 千电子伏峰中，除了上述两种可能性外，还有 In $-K_{\beta_1}$, $Z=115$ 的 L_{β_2} 及 $^{140}Ce(p, n)^{140}Pr$ 反应产生的 γ 射线等等. 这些可能性都定量考察过，并列于表 3.6-4 中. 由于这些都发生在谱线变动较大的区域，很难确定存在与否. 通过标准的解谱方法和统计分析，本样品中可能最大的是 $Z=126$ 的 L_α 谱线 (其浓度约为 200ppm). 但是，自 ^{140}Pr 产生的 γ 射线也是可能的选择对象. 不过，^{140}Pr γ 射线的贡献在这种情况下很小，因为质子的能量是 4.7 兆电子伏. 尽管最后确证超重元素(如 $Z=126$, 124, 116 等)是否存在于巨光环包裹体中还要进一步用别的方法验证，但是质子产生X射线发射 (PIXE) 分析提供了有意义的结果.

表 3.6-4 图 3.6-36 中 27.23 千电子伏峰的解释[39]

可能解释	能量 (电子伏)	宽度 (电子伏)	有关的峰 (计数)	对N的贡献
In$K\beta_1$	27276	340	InK_α − 74	−15±16
Te$K\alpha$	27400	505	TeK_{β_1} − 91	−500±700
Zn = 115$L\beta_2$	27249	340	115 L_{α_1} − 18	2±5
$Z=126L\alpha_1$	27253	340	126 L_{α_2} − 36	300±350
^{140}Pr γ	27230	340	CeK_α 61200	7±2

$E=27227\pm30$ 电子伏，FWHM $=360\pm30$ 电子伏，$N=168\pm44$ 计数

同其它几种微量分析方法比较，可以看出 PIXE 分析法的优点和缺点. 它介于X射线萤光分析 (XRF)，电子显微镜和中子活化分析之间. XRF 常以高精度确定较大样品中的主要元素，分析能力可以达 ppm 量级. 电子显微镜用聚焦很好的电子束观察

大小为微米范围的微粒．中子活化分析对某些元素具有很高的灵敏度．PIXE 可提供快速探索性的分析．空间分辨率和电子显微镜差不多，浓度分辨率则好于 XRF．不过，这个优点受到重的基体影响．另外两个分析方法，如光发射谱和原子吸收谱的灵敏度也在 ppm 量级，但只对单元素探测，如表 3.6-6 所示．

§3.7　核反应分析

带电粒子同靶原子核发生近碰可以发生各种核反应．相当多的核反应类型均可用来作为精密分析的手段．入射粒子和靶核发生核反应的条件是两者相对动能必须满足

$$E \gtrsim 1.44\frac{Z_1Z_2}{r} \tag{3.7-1}$$

r 为相互作用半径，单位是费米（$f_m = 10^{-15}$ 米），E 的单位是兆电子伏．一般低能原子核反应（10 兆电子伏以下）可用



$$x + X \rightarrow x' + X' \tag{3.7-2}$$

来表示，其中 x、X、x' 和 X' 分别代表入射粒子、靶原子核、发射粒子和剩余原子核．反应前后的总电荷值和总质量守恒．发射粒子一般为 γ 光子、中子、质子和 α 粒子．核反应遵从微观运动（如量子力学）规律，因此，即使（3.7-1）式的条件不满足，核反应也有一定的几率产生．不过，除了复合核共振反应和库仑激发外，反应率都很低．关于各种原子核反应机理可参考有关的书籍[60]，这里不作详细讨论．把低能核反应作为微探针分析手段，可分为三种类型：(i) 带电粒子活化分析（CPAA），即离子束仅用作产生特定的放射性原子核，轰击之后，这些放射性核发生衰变；(ii) 瞬发辐射分析（PRA），用固定能量轰击靶时测量特征反应产物；(iii) 共振反应分析（RRA），复合核共振截面的能量位移和展宽可提供相应同位素在物质中深度分布的信息．

一　核反应分析的一般特点

早在 60 年代就开始用探测核反应产物的方法来作化学分析．

随着半导体探测器的发展，核反应就逐渐广泛用于同位素微量分析．关于核反应中能量关系、反应运动学及 Q_B 值已在第一章第三节中给出．为方便讨论，我们把质量为 M_1 的粒子同质量为 M_2 原子核反应写成



$$M_1 + M_2 \rightarrow M_3 + M_4 + Q_B$$

Q_B 为反应中亏损的质能．当反应释放能量时，Q_B 值是正的；当反应为吸能时，Q_B 为负的．对任何一种反应，Q_B 是有确定值的．

能量 E_1 质量 M_1 入射粒子同质量 M_2（在实验坐标系为静止的）发生核反应，在方向为 θ 角上发射质量 M_3，能量 E_3 的发射粒子，显然应遵从能量和动量守恒定律（如图 3.7-1）．把方程（1.3-14）重写如下：

$$E_3^{1/2} = B \pm (B^2 + C)^{1/2} \tag{3.7-3}$$

其中 $B = \dfrac{(M_1M_2E_1)^{1/2}}{M_3+M_4}\cos\theta$ 和 $C = \dfrac{M_4Q + E_1(M_4 - M_1)}{M_3 + M_4}$.

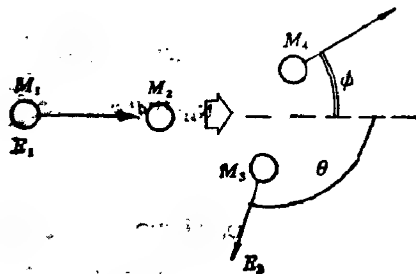


图 3.7-1 核反应示意图

方程(3.7-3)表明，在 E_1 和 θ 一定时 E_3 表示反应的特征．实际上，剩余核 M_4 可以处在激态也可以处在基态，这就对应着不同的 Q 值(同一反应中)，因此，就会有不同的 E_3 值．出射粒子能谱上呈现一系列的峰值，而且对所研究的反应是唯一的．所以，能谱可用来确定某种原子核 M_2 的存在．通常用固态探测器来进行这种测量，峰的能量可确定核反应(即是 M_2 原子核)，而从峰表面可确定元素 M_2 的含量．

在很宽的能量范围内，可把方程 (3.7-3) 近似写成

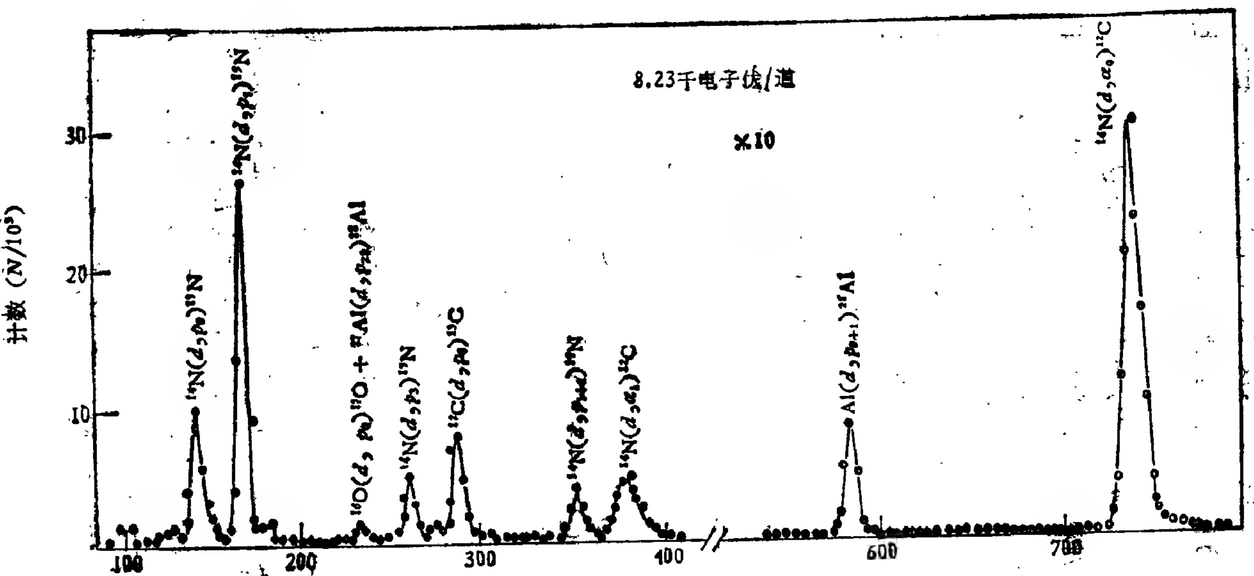


图 3.7-2 氘离子轰击 1700Å 厚氮化铝薄膜(在镍衬底上)的能谱图. $E_d = 1700$ 千电子伏，24 微米密拉吸收体，$\theta = 160°$

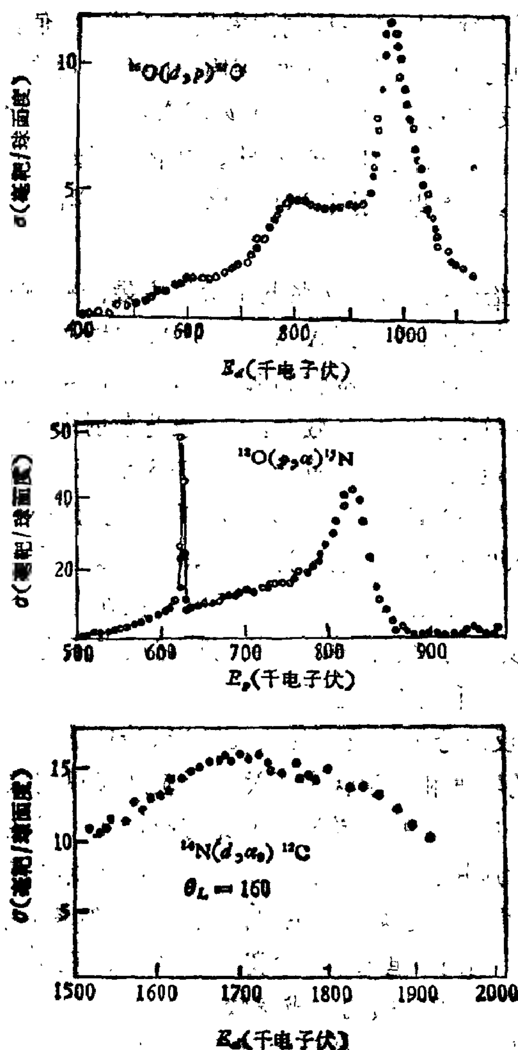


图 3.7-3 用于分析 ^{16}O、$^{18}O(\theta=165°)$ 和 $^{14}N(\theta=160°)$ 反应的微分截面

$$E_3 = \alpha E_1 + \beta \tag{3.7-4}$$

式中 α 和 β [类同于(3.7-3)式中的 B 和 C] 对应于特定的反应并随探测角度 θ 变化。因此，分析的选择性与核反应有关。在一般情况下，选择性都很好，特别是对相同元素但不同同位素的区分

更为有利．许多时候只有一种同位素具有正的 Q_E 值，其它同位素则不管浓度如何均可忽略．例如，用质子同含氧物质的作用，通过 $^{18}O(p,\alpha)^{15}N$ 反应只探测 ^{18}O，而 $^{16}O(p,\alpha)^{13}N$ 反应具有负的 Q_E 值，不可探测．这样，同背散射谱学相比，在同位素微量分析中核反应法具有优越性，因为背散射中 ^{18}O 和 ^{16}O 的运动学因子相差很小不易分开．

图 3.7-2 给出能量为 1.7 兆电子伏氘束轰击镍衬底上 1700 Å 厚的氮化铝薄膜后的能谱．$^{27}Al(\alpha,p_{0+1})^{30}Al$ 和 $^{14}N(d,\alpha_0)^{12}C$ 反应的峰位基本上是在谱中没有本底的部位．氧和碳污染物也看得清楚．

灵敏度依赖于反应微分截面，但不象背散射那样有分析形式．实验可精确测定核反应微分截面．图 3.7-3 是 ^{16}O，^{18}O 和 ^{14}N 的微分截面曲线．在 ^{16}O 情形时 $^{16}O(d,p_1)^{17}O^*$ 反应有一平台（位于 800 千电子伏和 900 千电子伏之间）．$^{18}O(p,\alpha)^{15}N$ 反应中，接近 730 千电子伏代表一静态截面；而在 629 千电子伏处有一个很强的窄共振．^{14}N 和氘反应可发射高能 α_0，故同其它反应不会干扰．其截面在 1650 和 1730 千电子伏之间有一平台．

此外，核反应分析涉及样品头几微米，并且是非破坏性的．其结果同原子的物理和化学状态无关（反应产额只同原子核有关）．例外的情形是单晶中的沟道效应对此有影响*)．但在某些条件下它具有特殊的应用．核反应分析结果是定量的，精度高（可达 99% 以上）．在作绝对量的测定时主要误差是出自参考标准．灵敏度很高（可低于 10^{12} 原子/厘米^2），深度分辨率也很好．但由于束斑一般大于 0.1 毫米，所以横向分辨率较差．

兆电子伏能区的入射粒子主要用质子和氘．较重的核要求能量也较高．

二 定量分析

(1) 带电粒子活化分析

带电粒子轰击原子核产生放射性核素已经研究了几十年．各

*) 带电粒子在晶体中的沟道效应将在第五章讨论．

种测量技术已经高度发展. 作为组分分析的一种手段，它同中子活化分析没有什么区别. 只是前者用离子束产生放射性核素后者是用中子束. 离子能够在靶物质中产生放射性核素的可能性只能是它的射程范围之内. 因此，产生一特定元素的总数目应是

$$N' = q\int_0^R N(x)\sigma(x)dx \tag{3.7-5}$$

式中 q 为入射粒子总数，$N(x)$ 和 $\sigma(x)$ 分别表示单位体积靶原子数和穿透深度为 x 处的反应截面. 如果材料是均匀组合则 N 与 x 无关，于是

$$N' = qN\bar{\sigma}R \tag{3.7-6}$$

式中

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{R}\int_0^R \sigma(x)dx$$

$$= \frac{1}{R}\int_{E_0}^0 \frac{\sigma(E)}{-\left[\frac{dE}{dx}\right]}dE \tag{3.7-7}$$

E_0 为入射粒子能量. 虽然求厚靶平均截面须知道 $\sigma(E)$，但与靶物质关系很小，因为在第二章电子阻尼能力的讨论中知道，当入射能量使 $\sigma(E)$ 变化不能忽略时，阻止能力 $\left(\frac{dE}{dx}\right)$ 主要是电子过程. 对于一定的入射粒子打到不同的靶物质上，其阻止能力 $\left(\frac{dE}{dx}\right)_e$ 依赖于入射粒子的速度，并须用与射程参数 R 有关的标度因子进行修正.

带电粒子活化分析适用于任何类型的加速器，但是用高能离子束分析重元素时一般不如中子活化分析好. 主要是本底辐射太强. 尽管如此，用小型加速器(如 1 兆电子伏静电加速器)的低能离子束分析轻元素，特别是表面层元素，将是很好的工具. 若采用脉冲束，可测量轰击后只有几毫微秒短的衰变. 目前大多数应用都集中在质子、氘、氚和氦-3 轰击产生的长寿命核素以及探测 γ 射线.

锆是重要的反应堆结构材料. 锆中碳、氧含量对其物理性能影响很大. 因此,用氘子活化反应测定锆中的碳和氧[63],其核反应分别为 $^{12}C(d, n)^{13}N$ 和 $^{16}O(d, n)^{17}F$. 用低能氘子辐照,基体锆不会产生干扰放射性核素,但锆中少量杂质可能产生 ^{11}C、^{18}F、^{15}O 等干扰核素. 一般用衰变曲线分解法可除去干扰的影响.

为了进行定量分析,采用相对法可以简化许多不定因素(实验几何条件不变).碳的标准用石墨,氧的标准用石英.用铝箔和金箔使入射的氘子能量降至适当值. 测碳时,能量为 4.9 兆电子伏,辐照时间样品为 10 分钟,标准为 2 分钟;流强: 样品辐照约 1 微安,标准约 0.5 微安;测氧时,氘子能量 4.0 兆电子伏,辐照时间: 样品和标准均 1 分钟, 流强约 0.3 微安, 在辐照后除去样品表面的污染,用 γ-γ 符合测量系统测量各 β^+ 发射体的湮灭辐射. 测碳时,样品冷却 20—30 分钟后测量 2 小时,以得到衰变曲线.测氧时,冷却 5 分钟,测量 10 分钟.

首先可用 (i) 最小二乘法[64] (ii) 线性方程法分解衰变曲线,求得 ^{13}N 和 ^{17}F 的计数率 A_N 和 A_F. 若用线性方程法,可先绘出衰变曲线(如图 3.7-4). 在曲线上选取适当的点(如果是四元核素体系,就取四点,如三元体系,则取三点). 每个点的计数是各核素计数的叠加,从而列出线性方程,解此方程组可得各组分的计数.

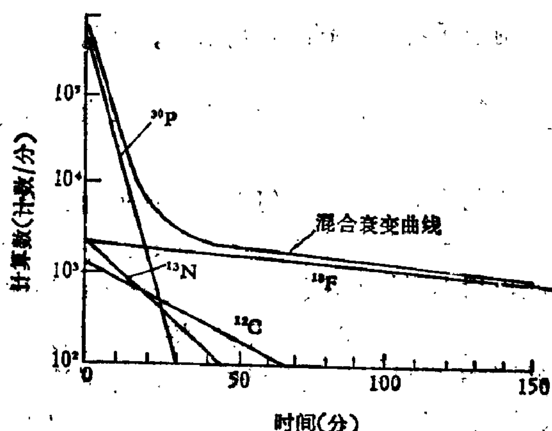


图 3.7-4 发射 β^+ 的各核素的混合衰变曲线及其分解[64]

求得 ^{13}N 或 ^{17}F 辐照停止时的计数后，即可用相对法按下式求出样品的含量

$$W_x = W_s \cdot \frac{A_x}{A_s} \cdot \frac{I_s}{I_x} \cdot \frac{R_s}{R_x} \cdot \frac{S_s^a}{S_x^a} \qquad (3.7\text{-}8)$$

式中W为待测元素含量，A 辐照停止时的计数率，I 为流强，R 为射程，S^a 为饱和因子，下标 s 代表标准，x 代表样品.

在测碳时，样品辐照后除产生 ^{13}N 外，还产生 ^{11}C, ^{18}F, ^{55}Co 等干扰核素，所以作这四种元素的衰变曲线分解，体系中 ^{13}N 的计数率占绝对优势，所以碳的精密度较好. 表 3.7-1 是用最小二乘法和线性方程法计算的结果，两者十分接近. 线性方程法虽比最小二乘法粗糙，但计算简便得多. 测氧时，除产生 ^{17}F 外，还产生 ^{15}O、^{13}N 等干扰核素，故作这三元体系的分解，石英标准样品辐照后除产生 ^{17}F 外，还有 ^{30}P 和 ^{18}F 干扰核素，故也要作衰变曲线分解. 由线性方程求得锆中氧含量为 $(2.3\pm0.6)\times 10^3$ppm.

表 3.7-1 锆中含碳的分析结果(单位: ppm)

样品编号		I	II	III	IV	平均
最小二乘法	作 ^{13}N, ^{11}C, ^{18}F 和 ^{55}Co 四元处理	36.0	37.8	39.6	37.3	37.3±1.5
线性方程法	作 ^{13}N, ^{11}C, ^{18}F 和 ^{55}Co 四元处理	39.5	34.6		36.6	36.9±2.5
	作 ^{13}N, ^{18}F, ^{55}Co 三元处理	36.8	35.6	35.4	38.4	36.6±1.4
	作 ^{13}N, ^{11}C, ^{18}F 三元处理	35.2	36.7	35.7	42.0	37.4±3.1

(2) 瞬发反应分析

瞬发反应是建立在两体运动学的基础上，较为简单. 这类反应中那些截面大或测量比较容易的反应最受欢迎. 因为这时根据能量和动量守恒原理只要观察到最后两个产物中一个的能量就足以确定反应. 一般选择简单轰击粒子和探测 γ 射线或简单出射粒

子．典型能谱还包含着相应于重的剩余原子核分立基态分得很开的尖峰．探测图象也比较简单：在测量 γ 射线或中子时，可把出射带电粒子弹性散射的干扰挡掉；在测量带电粒子时，反应峰的选择是正 Q_E 值，并且其位置应在弹性峰之上．某些情况下，可用几种反应束分析同一个元素．选择那一种反应取决于设备、分析材料的特点以及所取得信息的程度．所有直接反应的结果均含有深度的信息，因为探测粒子的能量损失直接反映束流在物质中穿过的能量损失．不同的反应，深度分辨率不同．

当入射能量一定时，能量损失可转化为反应发生的深度．这种情况类似于背散射表达式（3.1-17）．这时，从表面和从深度 x 处探测的粒子能量之差为

$$\Delta E = E'_x - E'_0 \approx x\left[\alpha S + \frac{S'}{|\cos\theta|}\right] \qquad (3.7\text{-}9)$$

式中 $E'_0 = \alpha E_0 + \beta$，$E'_x$ 是深度 x 处产生粒子逃出样品表面时所具有的能量．S 和 S' 分别是入射粒子和出射粒子的能量损

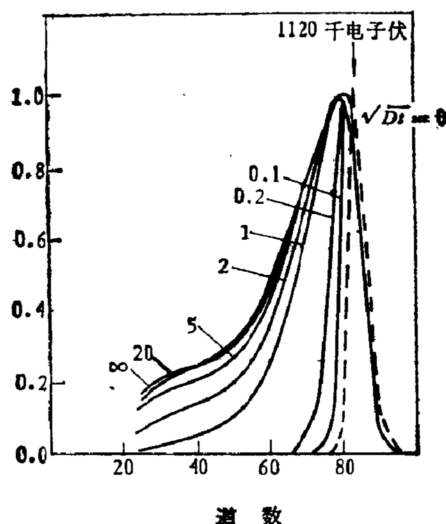


图 3.7-5 氧在锆中不同扩散系数（Dt）值计算的理论谱．[62] $^{16}O(d, p)^{17}O^*$反应，E_d=823 千电子伏

失．(3.7-9)式给出深度标度和能量标度之间的对应关系．原则上讲，如果截面已知，可从实验谱的形状推出浓度刻面．但是，这里必须考虑不同出射粒子的特征：在(p,γ)和(d,n)反应中只需要考虑入射粒子的能量；在出射粒子为带电粒子的反应中，如(d,p)和$(^3He,{}^4He)$反应，不但要考虑不同的运动学关系，而且有不同的阻止能力，深度分辨率是由总的探测分辨率决定的．它包括入射能量、立体角、探测系统和离散效应．

例如，研究氧在锆中的扩散效应．利用补偿误差函数计算相应于扩散系数不同值的各个浓度剖面的理论谱．然后同实验谱比较，可以确定元素的扩散特性．图3.7-5是氧在锆中不同扩散系数(Dt)值计算的谱．入射粒子是氘，能量$E_d=823$千电子伏，反应为$^{16}O(d,p)^{17}O^*$．此时，用于阻止背散射氘子的吸收体中质子有能量离散，所以深度分辨率不好．能量分辨率是40千电子伏，相当于氘子或质子在锆中的深度分辨率约0.25微米．

如果样品表面有一层氧化膜，可从连续谱中抽出薄膜的贡献，如图3.7-6所示．图是通过$^{16}O(d,p)^{17}O^*$反应得出的质子发射谱，可清楚看出，谱形是由表面为50Å厚的氧化层和本体中溶解

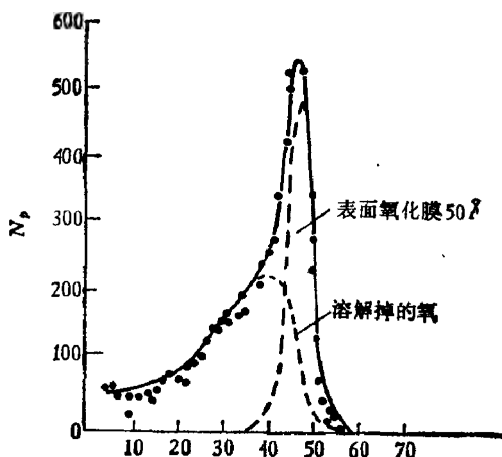


图3.7-6 钛样中$^{16}O(d,p)^{17}O^*$的质子谱[42]．实线为计算曲线是两部分之和

的氧的贡献之和.

一般说来，能谱峰形状所反映的深度剖面是实验因子和反应截面的卷积．用上述的浓度剖面模型模拟实验数据(图 3.7-5)，即重叠合法 (deconvolution)，或同均匀分布的标准样品相比较来取出浓度的深度分布．如果截面随能量变化是平滑的，误差最小．这就是说，从反应产物的能谱不仅可以得到能量，而且可得出每个能量间隔的粒子数目． 从 x 处厚度为 dx 薄片出来的反应产物数目 dN' 是

$$dN' = q \cdot N_i(x) \left.\frac{d\sigma}{d\Omega}\right|_{E_1} \cdot \Delta\Omega \cdot dx \qquad (3.7\text{-}10)$$

式中 q 为入射粒子数目，$N_i(x)$ 是单位体积探知原子的浓度，

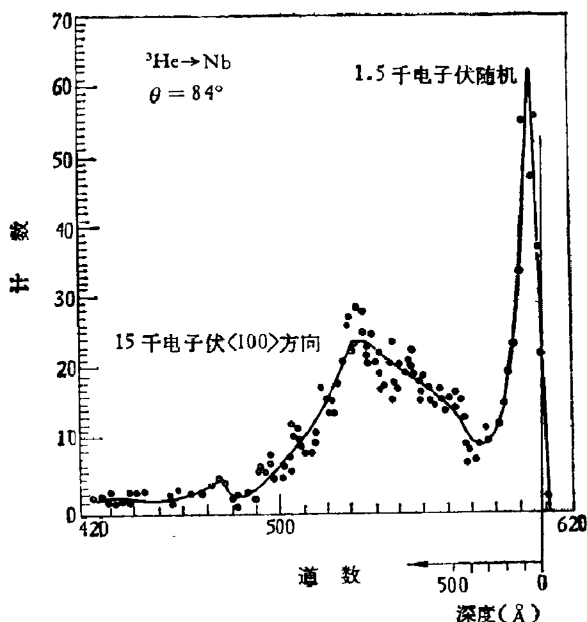


图 3.7-7 1 兆电子伏 D^+ 入射到 Nb 单晶上，同注入的 ^{3}He 发生 $^3He(d, \alpha)^4H$ 反应得到的 ^{4}He 能谱图[63]. 铌单晶沿〈100〉方向注入了 15 千电子伏 ^{3}He(剂量为 1.5×10^{17} ^{3}He/厘米^2)，随机方向注入 1.5 千电子伏 ^{3}He(剂量为 6×10^{16} ^{3}He/厘米^2)

$\frac{d\sigma}{d\Omega}$ 是微分反应截面，$\Delta\Omega$ 是探测器立体角. 故粒子的密度分布是

$$N_i(x) = \frac{1}{q}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\cdot\Delta\Omega\right)^{-1}\frac{dN'}{dx} \tag{3.7-11}$$

若引进多道分析器的道计数 $\frac{dN'}{dE_1}$，则有

$$N_i(x) = \frac{1}{q}\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\cdot\Delta\Omega\right)^{-1}\frac{dN'}{dE_1}\cdot\left.\frac{dE_1}{dx}\right|_x \tag{3.7-12}$$

$\left.\frac{dE_1}{dx}\right|_x$ 是函数 $E_1(x)$ 的微分. 若用 1.5 千电子伏 ^{3}He 在随机方向又在〈100〉方向以 15 千电子伏注入铌 (Nb) 单晶. 1 兆电子伏 D^+ 束垂直入射铌晶表面. 通过 $^3\text{He}(d,\alpha)^1\text{H}$ 反应得到 ^{4}He 能谱，如图 3.7-7 所示. 能谱给出两分立的剖面，相应于两个注入层. 用方程(3.7-12)就可以从 ^{4}He 能谱中计算 ^{3}He 注入铌中的密度分布. 其深度分辨率可达 10—20 Å.

(3) 共振反应分析

孤立的复合核共振就是当入射粒子的能量在一很窄的范围内，反应截面特别大. 在某些情况下，这会提供一个非常优越的深度剖析方法. 基本思想是把反应共振看成一个 $\delta(E_0 - E_R)$ 函数而忽略离散效应. 当入射能量 $E_0 = E_R$ 时，发生特定的共振反应，其强度正比于有关靶原子的面密度，这时反应是发生在表面的. 如果要探测的原子是在材料一定的深度 x 处，只有当轰击能量提高到 $E_0 = \Delta E + E_R$，共振反应才能发生，其中 ΔE 是束流从样品表面到深度 x 所损失的能量：

$$\Delta E = \frac{dE}{dx}x \tag{3.7-13}$$

且反应产额代表浓度 $N_i(x)$. 因此，产额曲线 $N'(E_0)$ 则是浓度剖面 $N_i(x)$ 的反映，如图 3.7-8 所示. 要精密确定浓度 $N_i(x)$ 还

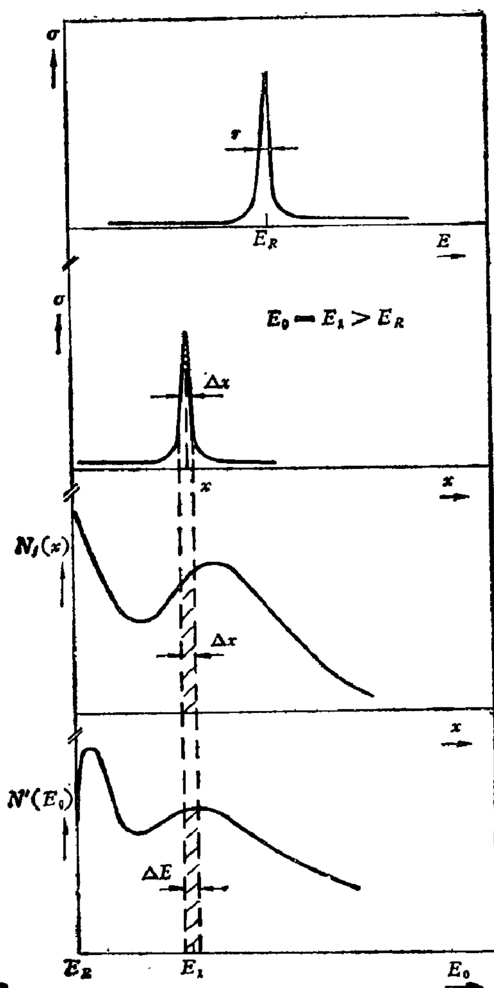


图 3.7-8 用共振反应进行浓度剖面测量原理

必须考虑能量离散效应。经过修正的 $N'(E_0)$ 和 $N_i(x)$ 之间的关系是

$$N'(E_0) = \int_0^{\infty}\int_0^{\infty} N_i(x)\frac{d\sigma}{d\Omega}(E)P(E_0, E, x)dxdE \quad (3.7\text{-}14)$$

式中 $P(E_0, E, x)$ 是入射能量 E_0 的粒子在深度 x 处能量在 $E \to E + dE$ 之间的几率. 解这类积分方程要计算 $P(E_0, E, x)$ 和

入射粒子的阻止能力(类似于第二章的方法). 例如用 629 千电子伏的 $^{18}O(p,\alpha)^{15}N$ 共振反应研究金属阳极氧化过程中氧的迁移. 图 3.7-9 是阳极氧化钽薄膜得到的谱(组分为 140 Å 的 ^{18}O 氧化物 + 840 Å ^{16}O 氧化物 + 520 Å ^{18}O 氧化物). 谱的分析表明示踪溶液中的氧化可产生 ^{18}O 示踪膜,而自然溶液中的氧化则没有 ^{18}O.



图 3.7-9 ^{18}O-^{16}O-^{18}O 的 Ta_2O_5 "夹层"靶 629 千电子伏的共振反应 $^{18}O(p,\alpha)^{15}N$ 得到的产额曲线[66]

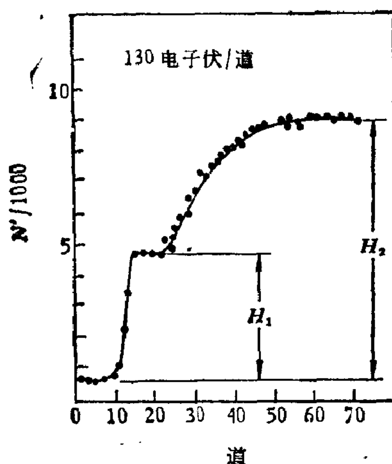


图 3.7-10 接近 992 千电子伏共振 $^{27}Al(p,\gamma)^{28}Si$ 激发曲线(样品是 0.8 微米铝层,表面有 475 Å 的阳极氧化物). 每道束流剂量为 40 微库[66]

利用产生 γ 射线的共振反应往往具有更好的深度分辨率, 因为 γ 射线探测方便, 而且穿透力强. 如在钽衬底上蒸发 0.8 微米厚的铝层,表面上还有一厚度为 475 Å 的阳极膜. 利用 $^{27}Al(p,\gamma)^{28}Si$ 反应 (E_R = 992 千电子伏)得到图 3.7-10 谱. 前沿陡而平台

好所对应于 Al_2O_3 中的深度分辨率 60 Å. Al_2O_3 中的平台高度 H_1 和铝的平台高度 H_2 之比则给出氧化膜的实际组分.

三 分析研究的范围

许多类型的核反应都可用于固态材料中的元素分析. 表 3.7-2 给出较为常用的核反应及有关的反应参数. 现在这些核反应正应用于许多研究领域,有的已发展成为常规的分析手段.

(1) 固态电化学

固体表面同气体或液体接触, 通过电化学反应生长一层化合物薄膜. 例如, 通过热反应或阳性反应在表面生成氧化物, 如在硅、铝、钽、铌、锆等. 用核反应方法研究这些材料表面氧化物形成的动力学过程,不仅可研究其生长规律,而且还可确定化学剂量和阴离子运动. 用 ^{18}O 同位素最有利,可探测很薄的氧化层, 灵敏度很高,达到单原子层. 不仅对氧而且对金属表面其它微量污染(如 C, N, F 等) 灵敏度也很高,因而它可研究材料各种表面处理(如制备、气氛、腐蚀等)将十分有利.

(2) 冶金

抛光的发展有利于表面不同处理时瞬时控制表面氧化膜或确定轻杂质元素的掺入. 如图 3.7-11 是镍样品经 $^{16}O(d, p)^{17}O^*$ 反应的质子谱. 图 3.7-11(b) 是把样品放在硫酸溶液 (H_2SO_4) 中进

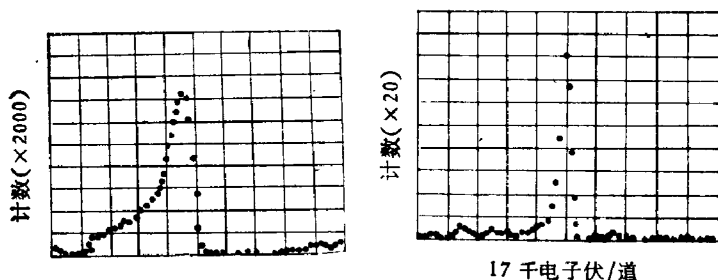


图 3.7-11 镍样上 $^{16}O(d, p)^{17}O^*$ 反应的质子能谱
(a) 未抛光的, (b) 抛光的 [62]

表 3.7-2　应用于材料分析的核反应

元　素	最有用的反应	Q 值(千电子伏)	入射粒子能量(千电子伏) E_{01}	$\frac{d\sigma}{d\Omega}$(毫巴/球面度)
^{6}Li	(p,α)	4.02	1900	~20
	(d,α_0)	22.36	1200	~4
			4000	
^{7}Li	(p,α)	17.347	1300	~1.5
	(p,γ)		400(*R*)	~6
^{9}Be	(d,α_0)	7.153	2300	~20(90°)
	(p,γ)	6.587	992(*R*)	~0.5
^{10}Be	(d,p)	11.049	1500—	
		2.832	4000	2—4
^{11}B	(p,α)	5.681	600(*R*)	~90
	(p,γ)		163(*R*) 469(*R*)	
^{12}C	(d,p)	2.712	1000	~30
	(p,γ)	1.944	459(*R*)	~0.13
^{13}C	(p,γ)	7.55	1748(*R*)	340
^{14}N	(d,p)	8.615	1700	~7
		1.305		
	(d,α_0)	6.701	1700	~1.6
^{15}N	$(p,\alpha\gamma)$	0.535	429(*R*)	~300
^{16}O	(d,p)	1.919	1490	~5
		1.048	850	~6
	(d,α_0)	3.116	930	~8
			1250	~6
^{18}O	(p,α)	3.973	629(*R*) 1776(*R*)	~60 ~100
^{19}F	(p,α_0)	8.119	1250 1355(*R*)	~0.6 ~3
	$(p,\alpha\gamma)$	2.064	872(*R*) 1275(*R*) 2000	~18 ~13 ~30—10
	(d,α)	10.033	1500	0.15
^{23}Na	(p,γ)	11.694	1417(*R*)	
			1778(*R*)	
^{25}Mg	(d,p)	8.890	1800	
^{24}Mg	(p,γ)	8.272	1548(*R*)	

表 3.7-2(续)

元 素	最有用的反应	Q 值(千电子伏)	入射粒子能量(千电子伏) E_{01}	$\frac{d\sigma}{d\Omega}$(毫巴/球面度)
^{27}Al	(p,γ)	11.583	992(R)	
	$(p,p'\gamma)$	-0.843 -1.368	~2000	
^{28}Si	(d,p)	5.499	~1700	0.26
	(d,p)	6.250	>1300	~5
		1.320		
	$(p,p'\gamma)$	-1.779	3100	
			3335	
^{31}P	$(p,p'\gamma)$	-1.266	>2150	
	(p,α)	1.917	1892(R)	~15
^{32}S	(d,p)	6.417	2000	
		3.197		
	$(p,p'\gamma)$	-2.237	3379(R)	
			3716(R)	

行 10 分钟的电化学抛光，因此表面区域的含氧量减少了 100 倍．很窄的峰呈现出这种抛光方法的效率是很高的． 剩下的氧约有 4×10^{15} 原子/厘米^2，几乎都集中在表面上，大约只有 3 个原子层．

(3) 薄膜制备

对于不同特性薄膜的沉积和生长，核反应可提供如下特性：可靠地确定化学剂量和深度(例如，SiO_2，SiO，Al_2O_3，Si_3N_4，AlN 等)，如图 3.7-2 所示，不同的峰对应不同的组．研究沉积机理，如活性和非活性溅射，热或“散烁”蒸发，化学汽相沉积（c. v. d＝chemical vapour deposition）和自注入等．由于核反应法能分析的元素范围较广．对各种类型的玻璃分析特别令人感兴趣，因为它们包含的元素是 Z 值处于中间大小(如 As，Ge，Te，Se 等)．核反应往往是精确确定这类复杂化合物化学剂量的唯一方法．值得注意的是要选择合适的衬底．

(4) 注入材料

对材料注入杂质的剖面进行深度分析，用共振反应较为优越，还可确定晶格位置. 例如氧注入磷化镓，利用 ^{18}O 注入和 (p, α) 反应，其深度分辨率可达 100 Å. 在图 3.7-10 中我们已经指出在碳化硅中注入铝，表面的深度分辨率可达 60 Å. 关于灵敏度，用 (n, α) 反应探测硼最好，可达 9×10^{10} 原子/厘米^2；若用实地离子蚀刻 (in-situ ionic etching) 的 (p, α) 反应可检测 10^{12} 硼原子/厘米^2 和 10^{14} 磷原子/厘米^2.

核反应应用正在向生物学渗透，如用 $^{18}O(p, \alpha)$ 反应研究大脑和循环系统中氧的同位素含量，确定氟对牙齿的穿透深度，以及环境污染对动植物各部分的影响和侵蚀。

四 材料中的氢剖析

近年来，不少种离子束的方法用来研究氢在物质中的分布，取得了显著的成效，如太阳风对月球岩石的影响；玻璃工艺品年代的确定：非晶硅太阳能电池；钢和铌的氢致脆 (hydrogen embrittlement) 等方面的研究，做到快速、非破坏性和高分辨本领.

用离子束进行氢剖析的基本方法有八类(十四种)列于表 3.7-3[67]. 表 3.7-4 则给出氢剖析的实验条件. 其中有些方法已在前面讨论过了，如背散射(见 § 3.1) 和一些核反应法. 还有一些方法，如二次离子质谱 (SIMS) 和观察氢在晶格中的位置等，将在后面的章节中讨论. 这里重点说明核共振反应，特别是 $^{15}N + ^{1}H \rightarrow ^{12}C + ^{4}He + 4.43$ 兆电子伏探测氢在超导物质中分布和行为[68]，从而阐明这些精密分析方法的实际意义.

$^{15}N + ^{1}H \rightarrow ^{12}C + ^{4}He + 4.43$ 兆电子伏(γ 射线)的核反应在质量中心系统中的 402 千电子伏处有一共振，相当于实验室坐标系的 6.385 兆电子伏，共振宽度窄（在 C. M. 系中为 0.4 千电子伏，在实验室系中是 6 千电子伏)，有大的共振截面(0.45 靶恩)，大约比非共振区的产额大三个数量级，而且同其它共振峰分得很开，

表3.7-3 几种氢元素剖析的基本方法

方法与反应	
1. 探测 γ 射线的核反应法:	
$H + {}^{19}F \longrightarrow {}^{4}He + {}^{16}O + \gamma$ 射线	(1)
$H + {}^{15}N \longrightarrow {}^{4}He + {}^{12}C + \gamma$ 射线	(2)
$H + {}^{7}Li \longrightarrow {}^{4}He + {}^{4}He + \gamma$ 射线	(3)
2. 探测产生粒子的核反应:	
$H + {}^{11}B \longrightarrow {}^{4}He + 2{}^{4}He$	(4)
$D + {}^{3}He \longrightarrow {}^{4}He + {}^{1}H$	(5)
$D + D \longrightarrow n + {}^{3}He$	(6)
$T + {}^{1}H \longrightarrow {}^{3}He + n$	(7)
3. 核向前散射	
${}^{1}H + {}^{35}Cl \longrightarrow {}^{1}H + {}^{35}Cl$	(8)
${}^{1}H + {}^{1}H \longrightarrow {}^{1}H + {}^{1}H$	(9)
4. 直接背散射	
$D + {}^{1}H \longrightarrow {}^{1}H + D$	(10)
5. 观察阻止能力的改变	(11)
6. 考察氢在晶格中的位置	(12)
7. 晶格损伤情况	(13)
8. 二次离子质谱 (SIMS)	(14)

其最临近的一个共振能量是 840 千电子伏(在 C. M. 系中). 用它测量物质中的氢是一个很灵敏的方法[69]. 测量时，用能量约为 6.385 兆电子伏的 ${}^{15}N$ 离子轰击样品，用 NaI 探测器来记录 4.43 兆电子伏的特征 γ 射线产额. 由于样品表面有污染和水分，当入射 ${}^{15}N$ 粒子能量达到共振能量 E_R(即 6.385 兆电子伏)时，共振首先发生在表面，特征 γ 射线产额正比于样品表面的含氢量. 如果提高束流能量，超过共振能量 E_R，表面上的氢就再也探测不到了，因为 ${}^{15}N$ 不再同样品表面的氢发生共振反应. 但是，由于 ${}^{15}N$ 离子通过样品时慢化，故在样品内部某一深度 x 又得到共振能量. ${}^{15}N$ 离子损失的能量 ΔE 和深度 x 满足(3.7-13)式，其 dE/dx 是样品材料对 ${}^{15}N$ 离子的阻止能力，可查能量损失表(见参考文献[1]). 如果氢存在于样品某一深度 x，那么特征 γ 射线产额正比于这个深度处的氢浓度 $N_H(x)$. 因此，改变入射 ${}^{15}N$ 离子的能量就可以得到氢浓度和深度之间的关系. 图 3.7-12 给出这个过程的

表 3.7-4　氢剖析的实验条件[67]*)

对应于表 3.7-3 的编号	(1)	(2)	(3)	(4)	(8)	(13)	(14)
离子束类型	^{19}F	^{15}N	^{7}Li	^{11}B	^{35}Cl	^{4}He	^{40}Ar
束流能量(兆电子伏)	17	7	3.5	2	30	2	0.05
束流(毫微安)	30	50	450	20	9	20	1000
束点大小(直径：毫米)	4	7	3.2	1	4	1	0.07
剖面的总电荷(微库)	45	200	3000	25	38	20	900
取谱时间(分钟)	45	120	100	45	69	17	15
氢峰纯计数**)	843	700	543	1000	647	100	5×10^{5}
探测粒子	γ 射线	γ 射线	γ 射线	α	^{1}H	^{4}He	$^{1}H^{+}$
探测器类型	NaI	NaI	NaI	Si	Si	Si	SIMS
探测器角度	~90°	0°	90°	90°	20°	170°	0°
过滤片	—	—	—	密勒	密勒	—	—
探测器立体角(毫弧度)	700	800	3100	740	0.7	4	—
靶对束流的倾角	0°	10°	0°	45°	80°	0°	60°
样品加热	0.51	0.35	1.58	0.04	0.054	0.04	0.05
深度分辨率的估计	20	14	170	40	21	20	10

*) 本表只列出表 3.7-3 中氢反应的部分实验条件，供参考.
**) 40 千电子伏质子注入剂量 10^{16} H/厘米^2.

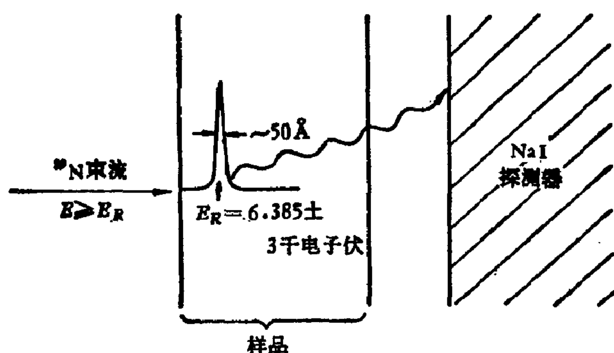


图 3.7-12　^{15}N 原子核共振反应法测量氢在物质中的分布示意图

示意图．共振谱线的形状为洛仑兹形，其半宽度 Γ_{lab} 不会因浓度分布而改变，此时 γ 射线产额可表示为

$$Y(E) = K_L Q \Gamma_{\text{lab}} \frac{\pi}{2} \cdot \frac{N_H(x)}{\frac{dE}{dx}} \tag{3.7-15}$$

式中 Q 为测量过程中样品积累的电荷，正比于入射 ^{15}N 离子的数目，K_L 为表征实验装置的特征常数，

$$K_L = \frac{\eta \Delta \Omega}{q} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{最大} \tag{3.7-16}$$

式中 η 和 $\Delta\Omega$ 分别是探测器效率和立体角，q 为入射粒子电荷，$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{最大}$ 为共振峰截面．常数 K_L 一般由实验决定．采用已知氢浓度的靶，如冰[68]．也可用蓝宝石注入已知剂量的氢．图 3.7-13 是用 ^{15}N 核反应进行氢剖析的实验装置．图 3.7-14 则是用该装置的 NaI 探测器记录的两个 γ 射线谱．两个谱均测量了六小时，一是束流照射六小时，一个是没有束流时测量的本底辐射．可见两谱之间的差别是 4.43 兆电子伏的 γ 射线以及单、双逃逸峰和康普顿散射．获取数据可把单道分析器窗口放在 3.3—4.8 兆电子伏之间．当然根据 (3.7-15) 式，要把 γ 射线产额转化为氢浓度的深度关系，应知道共振反应截面和探测器效率以及能量为 6.5—7.0 兆

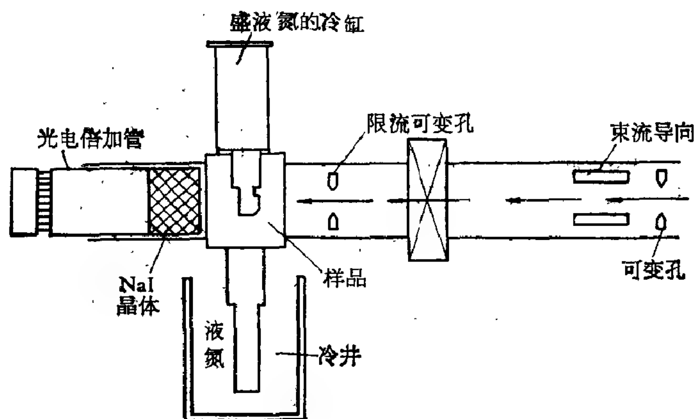


图 3.7-13　氢剖面分析的实验装置．γ 射线探测器直接放在靶后以得到最大的探测器立体角，靶室内保持在液氮温度下工作

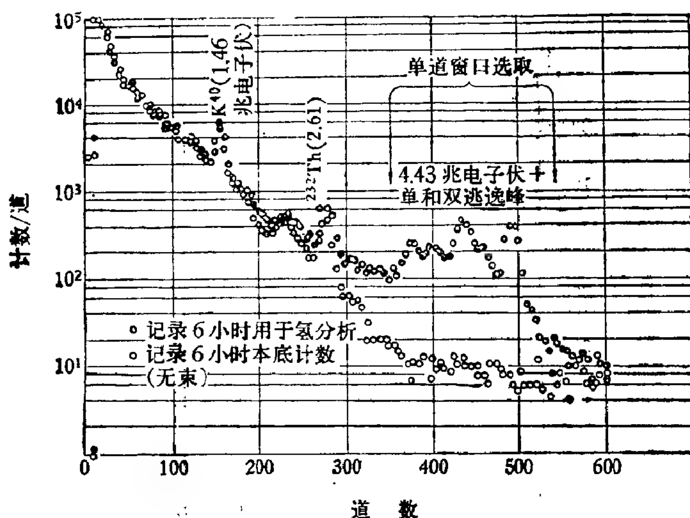


图 3.7-14 NaI 探测器得到的 γ 射线谱，两个谱均计数了六小时，一个有束流，一个没有束流仅测量本底. 氢剖析的计数区域可用单道选择窗口，包括 4.43 兆电子伏的能峰，两个逃逸峰及部分康普顿散射峰[67]

电子伏 ^{15}N 在材料中的能量损失.

图 3.7-15 是将氢注入到一个预荷电 Pd 样品所得到的一组氢剖面分析图. 图中小圆圈表示的数据点取自新鲜样品而且是入射束能量逐渐增加时得到的，圆点则是束流已在样品上照了一段时间，然后将其能量逐渐减少得到的. 显然，预荷电并未使氢均匀分布在样品之中. 相反，在深度约为十分之几微米处的 α 相和 β 相之间存在着一个相边界[68]. 在 77K 的温度下，能量为 100 千电子伏的氢在直径为 0.635 厘米的面积内，以 3.94×10^{17} H^+/厘米^{2}的剂量注入样品. 由氢在 Pd 中平均射程 ($R=0.17$ 微米)和射程分散 ($\bar{\sigma}=0.007$ 微米)计算注入氢的浓度剖面. 测量是在注入位置附近自左至右且在 77K 的温度之下进行的. 剖面分析束的直径也为 0.635 厘米. 图 3.7-15 最下面的两个谱是加温后得到的.

由图 3.7-15 可以看出，至少在注入前把样品装上所需的时间

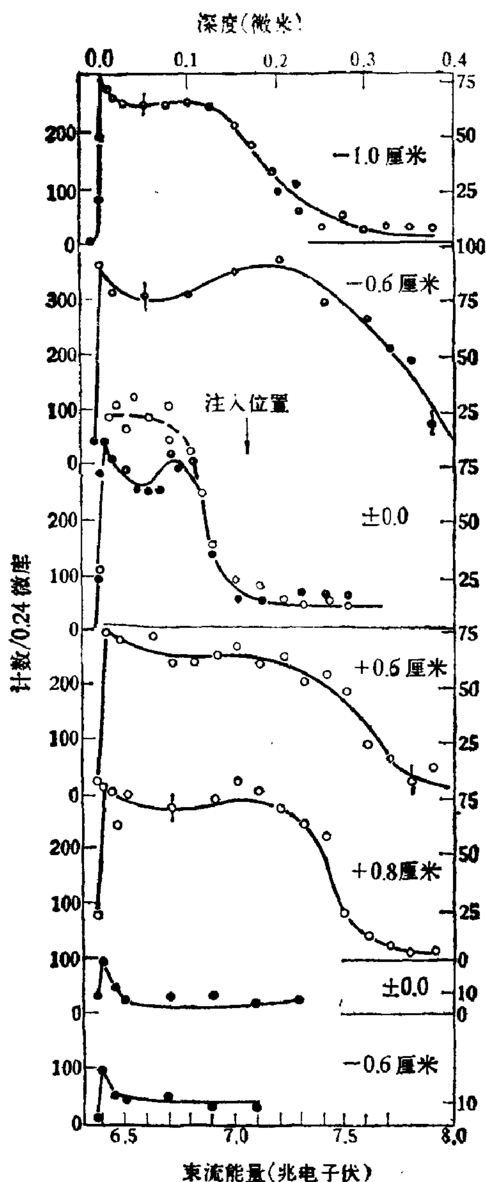


图 3.7-15 Pd 样品在室温下电解，再在 77K 下用 100 千电子伏的 H^+ 注入，注入位置标记为 ±0.0．首先测得剖面分布．其它剖面图的测量位置自左至右，离注入位置的距离表示在图中．剖面图由上而下为：−1.0，−0.6，±0.0，+0.6，+0.8 厘米，最下面的两个图是加温后取得的[48]

内，就是在室温下 α-β 相边界显得很尖锐而且稳定，这时注入区域没有加入氢．注入后，α-β 相边界向表面移动并错开，且注入的氢向前走动（在剖面图上标记为 ±0.0），又在注入区域左右移动（见标记为 ±0.6 的两个剖面）．所以 β 相实际是向样品里面移动了；在远离注入区的 －1.0 和 ＋0.8 厘米处，剖面图上的这种移动就比较少．注入区前面多余的氢在剖面分析束 ^{15}N 轰击下是不完全稳定的，仅在第一个剖面测量期间存在．当温度提高到室温时大多数氢从整个样品丧失掉．实验证明，用电解法进行预荷电的 Pd 样品，再注入氢，氢在样品中的行为同压力荷电 Pd 样品中的氢行为是不同的，并支持了 PdH 体系具有两个 β 相的建议．

理论上，由于质子是最简单的杂质，没有复杂的芯-电子结构，所以简单金属中质子行为及周围电子结构必然引起人们广泛的兴趣．在实用中，氢可能成为未来能源．因此，氢产生（包括电化学或热化学过程）和氢存贮，均要求深入了解氢对材料的致脆性和氢化物的形成．还有聚变反应堆的建立，等离子体约束，及聚变反应中发射快中子通过 (n, p) 或 (n, α) 对本体材料的氢注入，都必须深入研究氢同这些材料相互作用的基本物理过程，上述氢剖析的核反应方法是最有效的．

参 考 文 献

[1] J. W. Mayer and E. Rimini, Ion Beam Handbook for Material Analysis, Academic Press, INC., p. 21(1977).

[2] C. G. Darwin, *Phil. Mag.*, **28**, 499(1914).

[3] W. K. Chu, J. W. Mayer and M. A. Nicolet, Backscattering Spectrometry, Academic Press, p. 61(1978).

[4] W. K. Chu, J. W. Mayer, M-A. Nicolet, T. M. Buck, G. Amsel and F. Eisen, *Thin Solid Films*, **17**, 1(1973).

[5] W. K. Chu, J. W. Mayer, M-A. Nicolet, T. M. Buck, G. Amsel and F. Eisen, "Semiconductor Silicon" (H. R. Huff and R. R. Burgess, eds.), The Electrochemical Society, Princeton, New Jersey, p. 416(1973).

[6] K. N. Tu, W. K. Chu and J. W. Mayer, *Thin Solid Film*, **25**, 403(1975).

[7] J. K. Howard, W. K. Chu and R. F. Lever, "Ion Beam Surface Layer Analysis" (O. Meyer, G. Linker, and F. Käppeler, eds.) Plenum Press, New York, p. 125, (1976).

[8] T. W. Sigmon, W. K. Chu, H. Müller and J. W. Mayer, *Appl. Phys.*, **8**, 347 (1975).
[9] C. Sitter, J. A. Davies, T. E. Jackman, and P. R. Norton, *Rev. Sci. Instrum.*, **53**, 797(1982).
[10] H. H. Brongersma, N. Hazewindus, J. M. van Nieuwland, A. M. M. Otten and A. J. Smets, *Rev. Sci. Instrum.*, **49**, 707(1978).
[11] D. J. Ball, T. M. Buck, D. MacNair and G. H. Wheatley, *Surface Sci.*, **30**, 69(1972).
[12] R. L. Erickson and D. P. Smith, *Phys. Rev. Lett.*, **34**, 297(1975).
[13] H. H. Brongersma and T. M. Buck, *Nucl. Instr. Meth.*, **132**, 559(1976).
[14] F. P. Ziemba, G. J. Lockwood, G. H. Morgan and E. Everhart, *Phys. Rev.*, **118**, 1552(1960).
[15] B. R. Appleton, C. Erginsoy and W. M. Gibson, *Phys. Rev.*, **161**, 330(1967).
[16] E. Taglauer and W. Heiland, *Appl. Phys. Lett.*, **24**, 437(1974).
[17] M. Perdereau, *Surface Sci.*, **24**, 239(1971).
[18] J. T. McKinney and J. A. Leys, 8th. Nat. Conf. Electron Probe Anal., New Orleans, Louisiana, August 13—14, 1973.
[19] H. H. Brongersma and W. Schouten, *Acta Electron.*, 18, 47(1975).
[20] 闵乃本，晶体生长的物理基础，上海科学技术出版社，p. 342 (1982).
[21] A. Barcz, M. Croset, and L. M. Mercandalli, Low-energy Ion Beams (eds, I. H. Wilson and K. G. Stephens), J. W. Arrowsmith Ltd, Bristol, Great Britain., p. 124, (1980).
[22] J. P. Duchemin, M. Bonnet, F. Koelsch and D. Huyghe, *J. Electrochem. Soc.*, **126**, 1134(1979).
[23] H. H. Brongersma, F. Meijer and H. W. Werner, *Philips Tech. Rev.*, **34**, 362 (1974).
[24] W. P. Ellis and T. N. Taylor, *Surf. Sci.*, **75**, 279(1978).
[25] H. H. Brongersma, L. C. M. Beirens, Material Characterization Using Ion Beams (eds: J. P. Thomas and A. Cachard), Plenum Press, New York, p. 65(1978).
[26] Joseph A. Gardella, Jr. and David M. Hercules, *Anal. Chem.*, **52**, 226(1980).
[27] G. E. Thomas, G. C. J. van der Ligt, G. J. M. Lippits and G. M. M. van de Hei, *Applications of Surface Science*, **6**, 204(1980).
[28] R. T. Sanderson, Chemical Periodicity, Reinhold, New York (1960).
[29] S. Datz, C. Snoek, *Phys. Rev.*, **134A**, 347(1964).
[30] H. V. Seefeld, H. Schmidt, R. Behrisch, B. M. U. Scherzer, J. Nucl. Mat. **63**, 216(1976).
[31] H. Verbeek, Material Characterization Using Ion Beams, (eds. J. P. Thomas and A. Cachard), Plenum Press, New York, p. 303(1978).
[32] W. Eckstein, H. G. Schäffler, H. Verbeek, *Rad. Eff.*, **18**, 263(1973).
[33] R. Behrisch, B. M. U. Scherzer, and P. Staib, *Thin Solid Films*, **19**, 57(1973).
[34] A. Feuerstein, H. Grahmann, S. Kalbitzer, H. Oetzmann, in Ion Beam Surface Layer Analysis, Vol. 1, eds. O. Mayer, G. Linker, F. Käppler, Plenum, p. 471, (1976).
[35] T. M. Buck, Y. S. Chen, G. H. Wheatley, W. F. van der Weg, *Surface. Sci.*, **47**,

244(1975).

[36] R. Behrisch, W. Eckstein, P. Meischner, B. M. U. Scherzer, and H. Verbeek, Atomic Collisions in Solids, (eds. S. Datz, C. D. Moak and B. R. Appleton), Plenum Press, N. Y., p. 315, (1974).

[37] Proc. Int. Conf. on Particle Induced x-ray emission and its analytical applications, Nucl. Instr. and Meth., 142(1977), 181(1981).

[38] F. Folkmann, *J. Phys. E: Sci. Instr.*, 8, 429(1975).

[39] J. D. Garcia, R. J. Fortner and T. M. Kavanagh, *Rev. Mod. Phys.*, 45, 111 (1973).

[40] R. L. Kauffman, J. H. McGuire, P. Richard, and C. F. Moore, *Phys. Rev.*, A8, 1233(1973).

[41] J. M. Hansteen, O. M. Johson and L. Kocbach, *Atomic Data Nucl. Data Tables*, 15, 305(1975).

[42] D. H. Madison and E. Merzbacher, Atomic Inner Shell Processes, ed. B. Crasemann, Academic Press, New York, Vol. 1, p. 1, (1975).

[43] C. G. Soares, R. D. Lear, J. T. Sanders and H. A. Van Rinsvelt, *Phys. Rev.*, A13, 953(1976).

[44] W. E. Meyerhof, R. Anholt, T. K. Saylor, S. M. Lazarus, A. Little and L. F. Chase, *Phys. Rev.*, A14, 1653(1976).

[45] W. Bambynek, B. Crasemann, R. W. Fink, H. U. Fraund, H. Mark, C. D. Swift, R. E. Price and P. V. Rao, *Rev. Mod. Phys.*, 44, 716(1972).

[46] D. Burch, N. Stolterfoht, D. Schneider, H. Wieman and J. S. Risley, *Phys. Rev. Lett.*, 32, 1151(1974).

[47] K. W. Hill, B. L. Doyle, S. M. Shafroth, D. H. Madison and R. D. Deslattes, *Phys. Rev.*, A13, 1334(1976).

[48] F. Hopkins, A. Little, N. Cue and V. Dutkiewicz, to be published.

[49] R. L. Watson, A. K. Leeper, B. I. Sonobe, T. Chiao and F. E. Jenson, *Phys. Rev.*, A15, 914(1977).

[50] F. Folkmann, *J. Phys. E: Sci. Instr.*, 8, 429(1975).

[51] F. Folkmann, C. Gaards, T. Huus and K. Kemp, *Nucl. Instr. Meth.*, 116, 487 (1974).

[52] F. Folkmann, Ion Beam Surface layer Analysis (eds, O. Meyer, G. Linker and F. Käppeler) Plenum. Press, New York, vol. 2, p. 695, (1976).

[53] S. A. E. Johansson and T. B. Johansson, *Nucl. Instr. Meth.*, 137, 473(1976).

[54] J. S. Hansen, J. C. McGeorge, D. Nix, W. D. Schmidtoff, I. Unus and R. W. Fink, *Nucl. Instr. and Meth.*, 106, 365(1973).

[55] J. L. Camphell and L. A. McNelles, *Nucl. Instr. Meth.*, 125, 205(1975).

[56] 李民乾，陈志祥，盛康龙，秦俊法，柴廷文，汪学朋，金柏康，《核技术》2,1 (1979).

[57] J. W. Winchester, M. S. Wang, L. X. Ren, W. X. Lü, Hans-Christen ltansson, H. Lannefors, M. Darzi and Alistair C. D. Leslie, *Nucl. Instr. and Meth.*, 181, 391(1981).

[58] Chen Jian-xin, Guo Yuang-zhuang, Li Hong-kou, Ren Chi-gang, Tang Guohun; Wang Xi-de, Yang Fu-chia and Yao Hui-ying, *Nucl. Instr. Meth.*, 181,

269(1981).
[59] R. V. Gentry, T. A. Cahill, N. R. Fletcher, H. C. Kaufmann, L. R. Medsker, J. W. Nelson and R. G. Floochini, *Phys. Rev. Lett*, **37**, 11(1976).
[60] T. A. Cahill, R. G. Floochini, J. W. Nelson, N. R. Fletcher, H. C. Kaufmann, and L. R. Medsker, *Nucl. Instr. Meth.*, **142**, 307(1977).
[61] 梅镇岳，原子核物理学，科学出版社，p. 325，(1961).
[62] A. Cachard, and J. P. Thomas, Material Characterization Using Ion Beams, Plenum Press, New York, p. 367, (1978).
[63] 王荫淞、华芝芬、赵开华，全国第五次核物理会议资料，成都 A066 (1982).
[64] 李民乾，上海原子核研究所活化组，物理，**9**, 40(1980).
[65] W. Eckstein, R. Behrisch and J. Roth, in p. 821 of Ref. [52].
[66] G. Amsel, J. P. Nadai, E. D'artemare, D. David, E. Girard, and J. Moulin, *Nucl. Instr. Meth.*, **92**, 481(1971).
[67] J. F. Ziegler, C. P. Wu, P. Williams, C. W. White, B. Terreault, B. M. U. Scherzer, R. L. Schutte, E. J. Schneid, C. W. Magee, E. Ligeon, J. L. Ecuyer, W. A. Lanford, F. J. Kuehne, E. A. Kamykowski, W. O. Hofer, A. Guivarch, C. H. Filleux, V. R. Deline, C. A. Evans, Jr., R. Behritch, B. R. Appleton, and D. D. Allred, *Nucl. Instr. and Meth.*, **149**, 19(1978).
[68] 王广厚，物理学报，**33**, 53(1984).
[69] W. A. Lanford, H. P. Trautvetter, J. F. Ziegler and J. Keller, *Appl. Phys. Lett.*, **28**, 566(1976).

第四章　溅 射 物 理

当固体表面受到离子轰击时，就会发生复杂的能量转移，从而发射各种粒子，如原子、分子、电子和光子。若发射的是电子就叫做二次电子发射；若发射的是较重粒子或原子团，则叫做溅射。这时固体表面的状态也随之发生变化。早在本世纪初人们就已经注意到了对溅射现象的研究，之所以如此不仅由于溅射现象与粒子同固体表面相互作用的各种物理过程直接相关，而且还由于它有着重要的应用，如 (i) 聚变反应堆的壁效应，(ii) 表面分析，(iii) 离子加工和整形技术，(iv) 空间物理等。1969 年西格蒙德 (Sigmund)[1] 总结了大量的实验，在林哈德和汤普森 (M. W. Thompson) 等人[2]工作的基础上，由级联碰撞理论得到了元素溅射产额公式，这一公式描述了不同离子和单元素靶的组合，以及在不同入射能量下的溅射。在重离子轰击下，可以产生非线性级联碰撞的现象。这一现象已为安德逊 (H. H. Andersen) 和拜意 (H. L. Bay) 的实验所证实[3]。这种现象称做"热钉扎" (thermalized spike) 效应。

本章讨论溅射现象的基本特征、理论和实验处理，以及由此发展起来的一些重要的微探针分析方法的原理和应用。如：二次离子质谱、中性和离子感生辐射分析表面 (SCANIIR) 及离子感生俄歇电子谱学 (IIAES)。

§4.1　溅射的一般描述

一　运动粒子同固体表面的相互作用

一个离子同固体表面原子的相互作用，会发生各种基本过程，如离子穿透、碰撞级联引起晶格的扰动等。这些过程发生的时间小于 10^{-12} 秒。当入射粒子密度小于 10^{-6} 安/厘米时，由于入射粒

子同表面的所有相互作用过程低于 1000 Å 的总截面，故不会发生初离子引起上述过程的干涉。因此，在大多数情况下，一个离子束同固体表面的相互作用可以看成单个离子同它的作用。图 4.1-1 给出一个重离子（原子或分子）发射的几种过程示意图。初离子

表 4.1-1 离子撞击固体表面的效应

发射过程	靶表面区域的改变
1. 原子和分子	1. 表面粒子的损失
中性子	溅射
正离子	反冲注入
负离子	2. 注入
激活粒子	入射离子的注入
2. 电子	表面原子(反冲注入)
表面过程(如，俄歇退激)	3. 晶格损伤
本体过程(如，电离)	不完整
3. 光子	非晶化
气相过程	4. 化学效应
表面过程	键的破裂
本体过程	键的形成

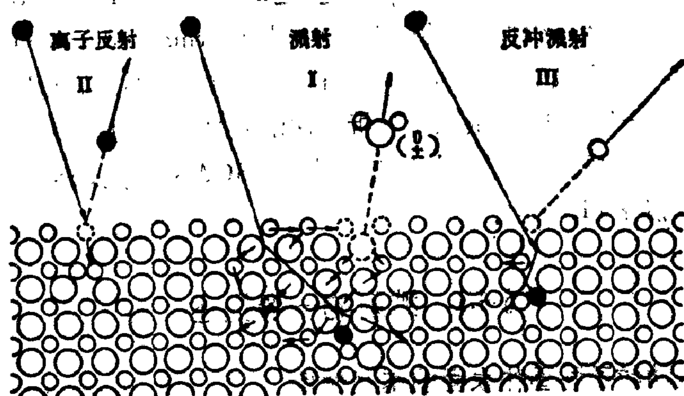


图 4.1-1 低能碰撞自固体表面产生溅射的示意图

穿进表面一定距离并被捕获（离子注入），粒子的能量逐渐沉积在晶格中。这种能量的一小部分随着动量方向指向表面而到达表面，

从而引起二次粒子发射. 这些二次粒子可以是原子，也可是分子；可以是带电的，也可以是中性的(图 4.1-1，I). 初离子也可被表面直接反射回来(图 4.1-1，II).

从入射离子在单次碰撞中直接把能量传给一个表面原子的过程，也会发射较高能量的二次离子，即所谓反冲溅射(图 4.1-1，III). 当入射粒子的能量是几千个电子伏时，溅射粒子的平均能量是几个电子伏的范围.

离子与靶碰撞的结果分成：发射过程和固体表面区域的改变(表 4.1-1).

(1) 发射过程

离子的轰击可使固体表面发射带电或不带电的粒子，如原子、分子、电子和光子. 这些带电和不带电的二次原子和分子可以处在激态也可以处在基态. 发射粒子一般是在表面几个原子层的区域，特别是重离子或分子离子，由于射程很短而不可能很深. 原子离子或中性粒子可从较深处发射出来.

离子感生二次电子可从表面不同过程得到，如俄歇去激，或者由入射离子或二次离子的俄歇中性化中产生. 也可从本体过程，如电离和俄歇跃迁中得到. 二次电子的能量分布可以提供离子轰击表面和发射二次离子时所发生基本过程的重要信息.

在固体表面前、表面上和本体内均可发射光子. 许多过程，如去激和中性化都能发射光子. 离子感生光子发射携带发射表面原子的重要信息(也即，表面的化学组分).

(2) 靶表面结构和形态变化的变化

离子轰击表面，不仅发射各种粒子，而且把能量传给接近表面的晶格，使入射离子碰撞点周围区域的状态发生变化. 这些变化有：

(i) 由于原子、分子发射和反冲注入，使发射区域的表面原子损失掉；

(ii) 入射离子和反冲表面原子的注入；

(iii) 晶格结构的变化，如不完整性和非晶态的产生；

(iv) 化学效应：如键的破裂和形成。

化学效应与晶格损伤有密切关系。

这里我们首先讨论，固体表面在离子轰击下发射较重粒子（原子、分子和原子团等）的过程，即溅射现象。

二　溅射的基本概念

(1) 溅射定义

入射粒子同固体表面碰撞使表面原子离开固体的现象，就是溅射。溅射现象广泛存在于自然界和实验室的研究中，例如，月球表面或其它星球表面受到等离子体的粒子（如太阳风）的轰击，加速器的离子源，电离气体放电的阴极等等。严格说来，我们所讨论的溅射应是

(i) 材料表面因粒子轰击受到侵蚀的现象；

(ii) 在入射粒子流小时所观察到的溅射；

(iii) 在入射粒子通量小时所看到的溅射；

(iv) 靶材料是均匀时观察到的溅射。

判据 (ii) 表明不计宏观加热引起的靶表面蒸发（升华），判据 (iii) 保证了一个粒子产生一个溅射事件，判据 (iv) 把碰撞感生的退吸 (desorption) 同溅射区别开来。

(2) 溅射产额

溅射中表面侵蚀的情况用溅射产额 Y 来度量，其定义为每个入射粒子使固体表面移出原子的平均数

$$Y=\frac{\text{溅射出的原子数}}{\text{入射粒子}}=\frac{\sum_i N_i}{n_0} \tag{4.1-1}$$

入射粒子可以是离子、中性原子、中子、电子或光子。对用单原子构成的分子离子作轰击粒子，一般可以分开考虑入射原子。否则

要定义每个分子的溅射产额．在计算从表面溅射的原子时，只考虑属于固体元素的原子，而把反射或再发射的入射离子除去．这与用固体元素相同的原子作轰击粒子的自溅射 (selfsputtering) 是不同的．

溅射产额的定义只有在溅射原子数正比于入射粒子数时才是有意义的．大多数情况均是如此．但是，如果入射粒子大(例如分子离子)，且能量大于 10 千电子伏会出现明显的偏离，这时钉扎效应会使产额同每个分子的原子数目有关．

除了轻离子入射外，典型的溅射产额是 1 至 5，一般是每个入射粒子产生零到一百个原子之间的任何数目．它取决于入射粒子能量，质量和角度，靶原子质量，固体的结晶度和晶体方位以及靶表面的束缚能，但同温度基本上没有关系．在垂直入射时，产生溅射的阈能是 20 到 40 电子伏．超过阈能，产额随入射能量的增加而增加，并且在 5 至 50 千电子伏的能量范围有一个宽的峰值．能量高时溅射产额减小，因为粒子穿进比较深，在表层沉积的能量

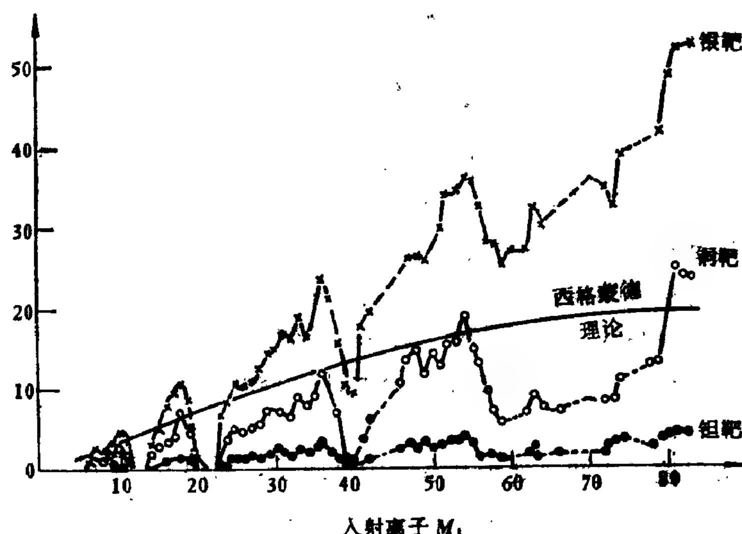


图 4.1-2　45 千电子伏离子入射时饱和溅射产额同 Z_1 的关系，光滑曲线是 (Sigmund) 西格蒙德[1]理论对铜靶的计算结果

少. 大多数情况下质量大的入射粒子, 溅射产额也大. 溅射产额同入射粒子原子数 Z_1 的关系, 在实验上[4,5]和理论上[1]已经研究过,如图 4.1-2 所示. 理论上解释产额随 M_1 的激烈振荡行为是在大剂量下靶表面形成 Z_1 和 Z_2 合金的溅射.

最近人们才对合金和化合物靶的溅射作较详细的研究[6]. 一般来说,固体表层一种组分以较大的速率溅射出去,另一种组分就会浓缩起来. 在低温下,扩散弱,容易得到定态条件;当温度高时,会向表层里面伸展,从而影响薄膜的溅射沉积,但可用溅射来作深度剖析.

(3) 溅射粒子的分布

溅射粒子在能量、电荷态和各个出射角均有相当宽的分布,并可用微分产额

$$\frac{\partial Y}{\partial E},\ \frac{\partial^2 Y}{\partial^2 \Omega}\ \text{和}\ Y_q\left(Y=\sum_q Y_q\right) \tag{4.1-2}$$

来表示. 在二次离子质谱(SIMS)实验中,只测量一定能量和电荷状态且发射到给定角度内的离子,即确定

$$\frac{\partial^3 Y_q}{\partial E\,\partial^2 \Omega}\Delta E\Delta\Omega.$$

这个量一般不与溅射产额成正比. 发射到不同态和能量的原子数以及发射粒子的角分布不是彼此独立的, 而且这些量对所有别的参数具有不同的依赖关系.

溅射粒子的能量分布一般在表面束缚能和其半值之间有一极大值. 在较高的出射能量时, 溅射粒子数目随 $1/E^2$ 的比例减少, 如图 4.1-3 所示. 当然,如果是处于钉扎(spike)情形, 偏离就很大.

溅射粒子主要是处于基态的中性原子, 而离子不到其中的 5%. 并且还会有原子簇的发射[7].

微分溅射产额的研究至今很不完整. 然而, 用清洁单晶表面进行溅射测量可以得到溅射过程和表面拓扑对碰撞级联影响的详

细信息。

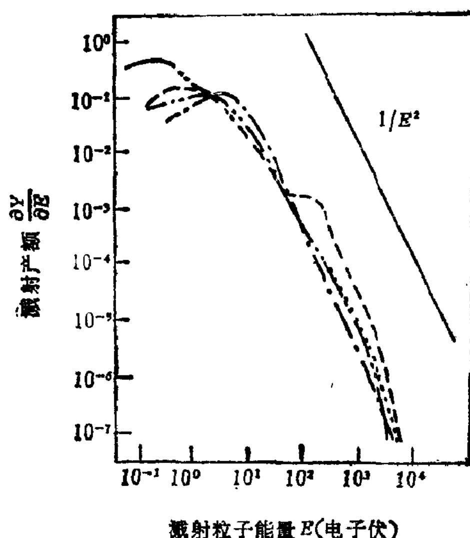


图 4.1-3 入射粒子为 Ar^+ 和 Xe^+ 垂直入射到金上的溅射原子的能谱. ---表示 43 千电子伏 Ar 入射到 Au⟨100⟩, —·—为 41 千电子伏 Ar 射到 Au⟨110⟩, ……41 千电子伏的 Ar 射到多晶 Au 上, —··— 为 Xe^+ 射到多晶 Au 上

(4) 溅射物理过程和计算方法

固体表面的溅射一般是离子同表层原子级联碰撞引起的. 其过程原则上与固体内部辐射损伤的过程相同*). 它们都是在远离热平衡区域发生的，因此溅射与蒸发不同.

一个入射离子同固体表面层原子碰撞，把能量转移给原子核. 如果转移的能量大于原子处在晶格位置的束缚能，就产生初反冲原子. 初反冲原子再同其它靶原子碰撞，并通过级联碰撞把能量配给它们. 如果转移给表面一个原子的能量使其反冲速度的方向有垂直于表面的分量，并且大于表面束缚能，则这个表面原子被

*) 辐射损伤问题将在第八章中讨论.

溅射出来。常常用升华热来近似表示它，而升华热比产生稳定位错(也即是固体内部的辐射损伤)所需要的位移能量要小。

辐射损伤效应主要是中子、电子或高能(>100 千电子伏)轻离子辐照固体引起的。这时能量转移给靶原子截面小而粒子在固体中的射程大。表面区域的碰撞级联稀少，溅射产额低。但当入射粒子质量大能量低($E<100$ 千电子伏)，溅射是主要的，粒子射程短且大多数能量在表面几百埃内就转移给晶格原子。

在结晶材料中产生初反冲原子以及碰撞级联的发展均受沟道、阻塞或荫蔽和聚焦效应的影响*)。入射粒子沿晶格低指数方向入射的溅射产额低可用沟道效应来解释，可是要用聚焦作用来解释这些方向存在优势发射就很困难了。有可能在次表层和表层之间的碰撞起着重要的作用。

为了定量描述溅射过程，要知道原子间碰撞中的参数(相互作用势或微分碰撞截面)、固体表面的结构和方位以及损失给电子的能量。对于非晶固体中的碰撞级联且在两体碰撞近似仍然成立的情况下，可利用玻耳兹曼迁移方程，选取某些参数得到的一级渐近解，从而给出分析公式[1]。这些公式提供产额同各种参数的依赖关系，因而是很有用的。然后，在此基础上加以改善，考虑其它效应(如化学过程)的影响，使之更加符合实验结果[8]。

要详细描述非晶和单晶中碰撞级联过程需对级联进行计算机模拟。非晶材料可用蒙特-卡罗程序进行模拟，而单晶则要把所有的晶格均存贮计算机中。当能量超过 100 电子伏特时可用两体近似，当能量低时可用经典动力学模型。在计算机模拟中，不管固体表面是完整的还是损伤的，也不管固体内部是否有损伤，都能有效地进行计算。多晶材料则可看成许多不同取向单晶结果的叠加。虽然这些计算已经获得非常好的结果，但是计算工作量很大，很费时。不过，把它所得到的级联分布同分析解的假定相比较是很有用处的。

---

*) 晶体沟道效应和阻塞效应在第五章讨论。

§4.2 溅射理论

一 溅射分类

通常把单元素溅射分成三种方式，或者叫做三种范畴：(a)单次或少次撞击方式；(b) 线性碰撞级联方式；(c) 非线性碰撞级联(钉扎)方式．如图 4.2-1．若从溅射产生过程来看，则分撞击溅射 (knockon sputtering) (弹性碰撞过程) 和电子激发的溅射．

(1) 撞击溅射

对于金属靶，弹性碰撞过程是最重要的．一个 10 千电子伏的氩离子速度大约是光速的千分之一．在真空中这个离子在 $\sim10^{-13}$ 秒的时间内走过的距离是 100 Å．这同传导电子的驰豫时间 ($\sim10^{-19}$ 秒)相比是很长的．因此，即使一个入射粒子在激发电子中消耗掉一部分能量，这个能量立刻为所有的电子分享，而不会给原子提供一个逃出的机会．

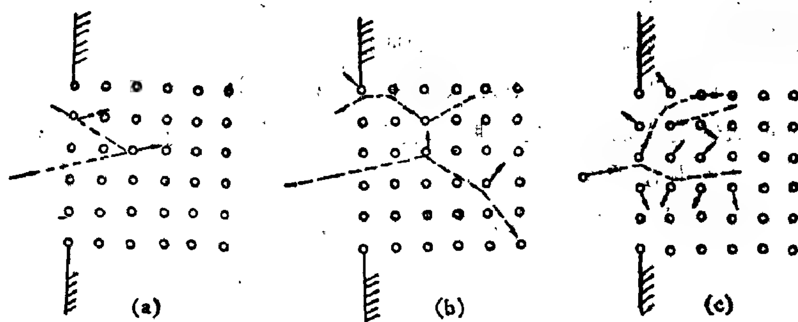


图 4.2-1 弹性碰撞溅射的三个方式：(a) 单次撞击方式．反冲原子从离子-靶碰撞接收足够高的能量而溅射，但不足以产生反冲级联．(b) 线性级联碰撞．反冲原子从离子-靶碰撞中获得足够高的能量产生反冲级联，但是反冲原子密度相当低，所以撞击碰撞是主要的且运动原子之间的碰撞几率很小．(c) 钉扎方式(致密级联碰撞)．反冲原子的密度很高，以致在钉扎区域内所有的原子都在运动

为了方便起见，图 4.2-1 定性上给出三种不同的情形。在单次撞击的范围内，轰击离子把能量传给靶原子，这个反冲原子经过少次碰撞后，克服表面束缚能而射出。在 (b) 和 (c) 的情况下，反冲原子都能获得足够高的能量，以产生二次或高次反冲原子，其中一部分可接近表面，克服位垒而逸出。线性级联不同于钉扎方式，前者运动原子的空间密度小，这已为双原子分子的离子轰击靶溅射实验所证实[3]。打在固体上的一个分子几乎立刻离解。根据慢化过程的统计特性得出，如果两个原子产生的级联足够稀疏，可以认为总的效应应该是两个碰撞级联的线性迭加。因此，溅射产额将近似是一个原子离子轰击时的两倍。而在钉扎情况下，大约有两倍的能量为相同体积（指单个原子离子轰击时）内的所有原子所共享。从这些原子的能量分布可知能够克服表面位垒的原子数大大增加。因此，一个分子的溅射产额在钉扎情况下远大于原子离子轰击时溅射产额的两倍。

设想原子是从确定厚度 Δx 层发出的，那么溅射产额正比于该层产生的反冲原子数。在单次撞击中，这个数目正比于适当的截面；在线性级联方式中，它正比于有关的能量，也就是说，单位深度所沉积的能量；在钉扎方式中，人们把温度同单位体积所沉积的能量联系起来，并且从蒸汽压来确定产额。

定性地说，单次撞击方式是在入射粒子能量为几十电子伏特，只有很轻的入射离子可扩展到上千个电子伏特的范围。线性级联碰撞是入射粒子能量在千电子伏和兆电子伏的范围。不过在这个能区中，若入射离子很重则可产生钉扎。

(2) 电子激发溅射

在绝缘体中，电子激态寿命足够长，可使激发能转化为原子运动。完成这个转化有许多方式；一种模型是分子束缚的基态激发到非束缚的激发态（图 4.2-2）。如果非束缚激态的寿命等于或大于原子核彼此排斥而分开所需的时间，就会发生离解。

类似图 4.2-1 所示的三个范围，我们得到，在阈值区域时电离

或离解事件在空间是孤立的. 这类事件可用紫外光子、低能电子（$\lesssim 100$ 电子伏）或低能离子$\left(\text{离子速度 } v \lesssim \frac{e^2}{\hbar}\right)$来产生. 线性级联代表高能二次电子（$\gtrsim 100$ 电子伏）产生二次电离的情形. 这种情形在高速$\left(v \gg \frac{e^2}{\hbar}\right)$离子入射时是主要的. 而中能重离子$\left(v \gtrsim \frac{e^2}{\hbar}\right)$则产生致密电离钉扎. 应该注意，在后面两种情形下，溅射事件伴随着电子或光子发射. 遗憾的是，无论是电子激发溅射还是与此有关的其它发射现象，至今仍未详细研究[6].

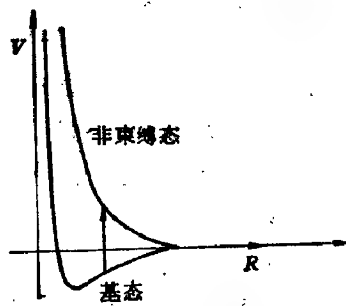


图 4.2-2　一个双原子分子的束缚和非束缚态示意图. V 是原子间的相互作用能. R 是两个原子核之间的距离

二　玻耳兹曼迁移方程

用迁移理论的框架来讨论图 4.2-1a—4.2-1c 所示各种类型的多次碰撞过程是较为方便的. 玻耳兹曼方程确定着函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$，而 $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)d^3r d^3v$ 是对时刻 t 速度 $(\mathbf{v}, d^3v)$ 在 $\mathbf{r}$ 处体元为 d^3r 内原子数目的统计平均. 在单元素介质中玻耳兹曼方程取

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r + \frac{\mathbf{k}}{m} \nabla_v\right) f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int \sigma(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1; \mathbf{v}', \mathbf{v}'') \cdot d^3v_1 d^3v' d^3v'' \cdot |\mathbf{v} - \mathbf{v}_1| (f'f'' - ff_1) \qquad (4.2.1)$$

式中 $\sigma(\mathbf{v}, \mathbf{v}_1; \mathbf{v}', \mathbf{v}'') d^3v' d^3v''$ 是初速度 $\mathbf{v}$ 的入射粒子同初速为 $\mathbf{v}_1$ 的靶原子彼此散射到速度为 $(\mathbf{v}', d^3\mathbf{v}')$ 和 $(\mathbf{v}'', d^3\mathbf{v}'')$ 中的微分散射截面，如图 4.2-3. 而且，$f_1 = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}_1, t)$，$f' = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t)$ 等，$\mathbf{k} = \mathbf{k}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ 是加在运动粒子上的外力. 诚然，可将(4.2-1)式推广到两个或多元素系统中去，只是要增加适当的脚标数.

(4.2-1) 式中有一个简单的重要的假定，即分子混沌的假定 (molecular chaos)，它表明在每次独立碰撞之后粒子在位置和速

度空间的详细情况是杂乱无章的，也即是说，依次碰撞的初始条件仅由统计分布函数 $f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$ 确定而同前面发生的事件无关. 这种假定的可靠程度随 (4.2-1) 式在穿透现象中应用范围的改变而不同. 玻耳兹曼迁移方程在物理学中有很多应用. 例如在电导率理论及有关现象中外力是电场，位置变量就消失了，并且右边的碰撞常常可作简单的处理. 在气体动力论中，碰撞项的一般形式是没有外场下麦克斯韦-玻耳兹曼速度分布偏离程度的基础. 此时空间变量也不重要.

原子多次碰撞和离子穿透所遵从的规律类似于中子穿透问题，但常常略去外力 ($\mathbf{k}=0$) 并假定靶粒子最初是静止的，对于足够快的入射粒子

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, 0)=N\delta(v_1) \tag{4.2-2}$$

其中 δ 是狄拉克 δ 函数，N 是靶粒子在实际空间的密度.

现讨论两个重要的极限情形. 如果只考虑入射粒子的命运，而不考虑靶粒子的运动，则 (4.2-1) 式简化为

$$-\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\cdot\nabla_r\right)f(\mathbf{r},\mathbf{v},t)=N\int d^3v'[vf\sigma(\mathbf{v};\mathbf{v}') - v'f\sigma(\mathbf{v}';\mathbf{v})] \tag{4.2-3}$$

相反，当反冲原子的运动是主要时，(4.2-1) 式可对稀疏级联碰撞情况进行线性化，也即是说，其中只有一小部分原子是运动的

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)=N\delta(\mathbf{v})+F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \tag{4.2-4}$$

这里 F 是不大的，所以，式 (4.2-1) 变成:

$$-\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\cdot\nabla_r\right)F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)=N\int d^3v'd^3v'' \cdot[vF\sigma(\mathbf{v};\mathbf{v}',\mathbf{v}'')-v'F'\sigma(\mathbf{v}';\mathbf{v},\mathbf{v}'') - v''F''\sigma(\mathbf{v}'';\mathbf{v}',\mathbf{v})] \tag{4.2-5}$$

在 (4.2-6) 式中，$\sigma(\mathbf{v};\mathbf{v}',\mathbf{v}'')$ 代替 $\sigma(\mathbf{v};0;\mathbf{v}',\mathbf{v}'')$，而在 (4.2-3) 式中，有

$$\sigma(\mathbf{v};\mathbf{v}')\equiv\int d^3\mathbf{v}''\sigma(\mathbf{v};\mathbf{v}',\mathbf{v}'').$$

方程 (4.2-3) 是解决离子穿透物质理论的基础，而方程 (4.2-5) 则用于线性级联碰撞理论. 两者主要区别，是后面的情况考虑了反冲效应.

实际上，在粒子穿透和级联碰撞理论中还常常用到其它类型的线性迁移方程. 不过，它们在物理上是等效的. 我们则根据西格蒙德溅射理论[1]，重点讨论线性级联碰撞理论的某些结果和由此得到的溅射产额. 西格蒙德的基本方程形式为



图 4.2-3 两碰撞粒子的散射几何

$$-\left(\frac{\partial}{\partial t}+\mathbf{v}\cdot\nabla_r\right)G(\mathbf{r},\mathbf{v},\mathbf{v}_0,t)=Nv\int\sigma(\mathbf{v};\mathbf{v}',\mathbf{v}'')$$
$$\times d^3v'd^3v''(G-G'-G'') \qquad (4.2-6)$$

式中 $G(\mathbf{r},\mathbf{v},\mathbf{v}_0,t)\,d^3r d^3v_0$ 是在时间 t 体积 $(\mathbf{r},d^3r)$ 中运动速度为 $(\mathbf{v}_0,d^3v_0)$ 原子的预期数目，$\mathbf{v}$ 是在 $t=0$，$\mathbf{r}=0$ 产生级联的粒子的初速度. 因此，(4.2-6)式是对一定的时间间隔积分的，而(4.2-5) 式则是微分的. 附录 I 给出 (4.2-5) 式和 (4.2-6) 式的等效性.

三　线性级联理论的基本特点

级联理论中主要感兴趣的量是参加级联原子的预期数. 确定这个量是辐射损伤中的经典问题，而且同气体中高能电子引起电离级联所产生自由电子数目的问题密切相关. 在这些情况下，如果这个数目大于 1，则它正比于初始能量(当然应除掉消耗在其它方面的能量).

令 $N(E_0, E)$ 是级联中初能量大于 E 值的原子的平均数目. 这种级联是由初能量为 $E_0(>E)$ 的入射离子或反冲原子引起的. 当然；这个平均是对大量级联求平均的. 如果考虑弹性碰撞并忽略靶原子之间的所有束缚力，且当

$$\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}E_0\gg E$$

时，则可从 (4.2-3) 式找到 $N(E_0, E)$ 的渐近表达式[10]

$$N(E_0, E) \sim \Gamma_s \frac{E_0}{E} \tag{4.2-7}$$

其中

$$\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}E_0 = T_{max}$$

是离子与靶原子对头碰时传给靶原子的最大能量，见 (2.1-5) 式，M_1 和 M_2 分别为离子和靶原子质量．而且，由 (2.2-30) 式的微分截面得到，

$$\Gamma_s = \frac{s}{\psi(1) - \psi(1-s)} \tag{4.2-8}$$

和 $\psi(x) = d[\log \Gamma(x)]/dx$．(4.2-7) 式推导的详细步骤可参考有关的文献[10]．这里着重讨论其物理意义．表 4.2-1 给出不同 s 值时得到的 Γ_s 值．可以看出参数 Γ_s 同表征散射截面的指数 s 关系很弱．显然，参加一个碰撞级联的原子数目对能量在原子中详细分配方式并不灵敏(图 4.2-1 b)．具体地说，这个数目同入射粒子的能量关系密切，而同其质量或原子数关系不大．

表 4.2-1 (4.2-8)式的 Γ_s 值

s	0.500	0.333	0.250	0.000
Γ_s	0.361	0.452	0.491	0.608

再考虑电子阻止的影响．电子激发所消耗的能量是近似连续的．根据林哈德等人[10]的理论，只有

$$\nu(E_0) = E_0 - \eta(E_0) \tag{4.2-9}$$

这部分能量用于产生反冲原子，而 $\eta(E_0)$ 是整个慢化过程中(包括入射粒子和所有反冲原子)电子激发和电离所损失的能量．因此，当电子阻止不可忽略时，(4.2-7) 式中的 E_0 需用 $\nu(E_0)$ 来代替．但是，由于电子阻止依赖于速度而不是能量 [见第二章 (2.3-34) 式]，故 $\nu(E)$ 同离子的质量有关．

从 (4.2-7) 和 (4.2-9) 式出发并微分就很容易得到反冲到给定能量间隔 (E, dE) 的平均原子数 $F(E_0, E)dE$：

$$F(E_0, E) \sim \Gamma_s \nu(E_0)/E^2 \tag{4.2-10}$$

$F(E_0, E)$ 称为反冲密度．此时仍在

$$\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}E_0 \gg E$$

时成立．由于高阶反冲占主要地位，所以入射粒子的初始运动方向无关重要，而且在立体角 Ω 中的分布是各向同性的：

$$F(E_0, E, \Omega)dEd^2\Omega \sim \Gamma_s \frac{\nu(E_0)}{E^2} dE \frac{d^2\Omega}{4\pi}, \tag{4.2-11}$$

这同各向异性上的偏差因子约 $\left(\frac{M_1E}{M_2E_0}\right)^{1/2}$．

现在来讨论一下反冲原子的空间分布．由于反冲原子的数目正比于能量［(4.2-7) 式和 (4.2-11) 式］，可以断言反冲原子在空间的展宽正比于能量展宽．因此，如果我们定义一个离子从 $r=0$ 开始慢化所淀积的能量密度是 $F_D(E_0, \mathbf{\Omega}_0, \mathbf{r})$，则有

$$\int d^3r F_D(E_0, \mathbf{\Omega}_0, \mathbf{r}) = \nu(E_0) \tag{4.2-12}$$

其中 $\mathbf{\Omega}_0$ 是运动初始方向的单位矢量． 故人们可以假定反冲原子是按照如下分布发生的

$$F(E_0, \mathbf{\Omega}_0, E, \mathbf{\Omega}, \mathbf{r})dEd^2\Omega d^3r \sim \Gamma_s \frac{F_D(E_0, \mathbf{\Omega}_0, \mathbf{r})}{E^2} \times dE\frac{d^2\Omega}{4\pi}d^3r \tag{4.2-13}$$

此方程已由西格蒙德从弹性碰撞的角度加以证明，数学推导很冗长，需要求分布函数的空间矩*)．物理内容是高能粒子确定的碰撞级联的空间总扩展，而且任何精细结构必须在单粒子分布函数中平滑掉．因此，(4.2-12) 式中所表明的高和低能原子简单分离行为的偏离是 $R(E)/R(E_0) \ll 1$．根据第二章的 §2.2，s 随能量缓慢变化，于是就产生是能量 E 还是 E_0 确定 s 的问题．显然只能近似解决这个问题．对于 $E_0 \gg E$，值 $s=s(E)$ 最合适，因为这时

*) 这点在第八章还要讨论．

大多数碰撞是发生在能量接近于 E 的区域。

最后，考察一下淀积的能量密度 $F_D(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, \mathbf{r})$. 完全确定 $F_D(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, \mathbf{r})$ 是相当复杂的问题. 它不同于阻止能力的概念. 阻止能力是讨论单个运动粒子损失的能量，而不考虑由于反冲原子使能量重新分配. 这里则是考虑能量在整个碰撞级联中所有粒子(入射离子和反冲原子)的分享而使能量"淀积"下来. 关于能量淀积问题，我们在辐射损伤时还要讨论. 能量密度 $F_D(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, \mathbf{r})$ 很容易用其空间矩表示出来及淀积能量的深度剖面是[12]

$$F_D(E_0, \theta_0, x) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dz F_D(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, \mathbf{r}) \quad (4.2\text{-}14)$$

验证这个公式的实验测量工作是辐射损伤(无序)随能量的变化. 因此，当初能量 E_0 远比阈能大，并且非碰撞过程(迟豫、扩散)对剖面不起主要影响时，无序的深度剖面是遵从 $F_D(E_0, \theta_0, x)$ 的. 图 4.2-4 是理论计算和实验测量结果的比较.

定性地说，能量淀积剖面与相应穿透剖面之间具有标度性质，形状相似，深度则后者比前者大. 当质量比 M_2/M_1 较高时，入射粒子大角散射是主要的，反冲运动则不重要. 相反，M_2/M_1 质量比愈小，重离子阻止很快，反冲原子尽管能量较低但仍有一定射

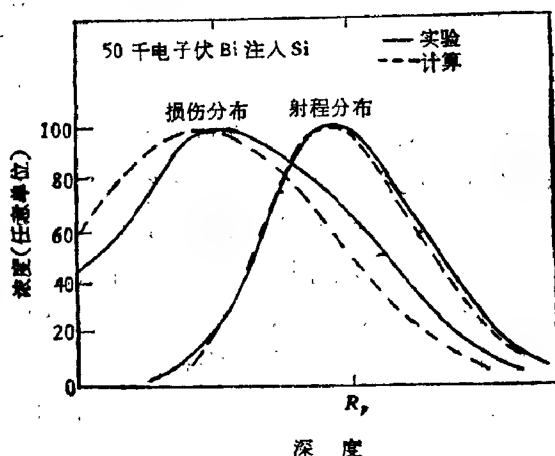


图 4.2-4　离子穿透和损伤剖面测量和理论计算结果的比较

程，故能量淀积剖面有一定的形状。

四 线性碰撞级联的溅射

(1) 无限介质中的粒子通量

诚然，没有靶表面就不会有溅射．但是，为了方便起见，在求入射粒子引起反冲原子通量时暂不考虑表面的存在．其原因是，第一、守恒定律(4.2-12)式在无限介质中是成立的，而且可用它来简化理论处理步骤．第二、更重要的是适应各种实验几何条件，如一粗糙表面的溅射、透射溅射等．直接有关的问题是半空间的问题，其最简单的几何条件是包含一个平的表面．无论怎样，靶表面的影响应进行修正．此外，有时采用无限靶几何特性来模拟实验结果反而比半空间要好，例如，溅射粒子打到收集器上并反射回到靶中的情况就是如此．

设有一个离子源在单位时间内提供初能量 E_0 的入射粒子数 n_0，产生运动靶原子的静态分布．令 $G(E_0, E)dE$ 是任何时刻能量为 (E, dE) 运动原子的平均数目，于是有

$$G(E_0, E)dE = n_0 N(E_0, E)dt \tag{4.2-15}$$

其中

$$dt = \frac{dE}{(dE/dt_0)} = \frac{dE}{v|dE/dx|} \tag{4.2-16}$$

是一个反冲原子从 $E+dE$ 慢化到 E 所需的平均时间，v 是能量 E 的靶原子速度，$N(E_0, E)$ 由(4.2-7)式给出．确实，由于只有能量大于 E 的反冲原子可以通过间隔 (E, dE)，故 $G(E_0, E)$ 应正比于 $N(E_0, E)$．从(4.2-15)和(4.2-16)式得到

$$G(E_0, E) = \frac{n_0 N(E_0, E)}{v|dE/dx|} \equiv n_0 \frac{E}{v|dE/dx|} \cdot F(E_0, E) \tag{4.2-17}$$

其反冲密度 $F(E_0, E)$ 由(4.2-10)式给出．如果 $\mathbf{r}=0$ 处的一个离子源能够在单位时间内和方向 $\boldsymbol{\Omega}$ 上提供能量 E 的初粒子束 n_0 并把由(4.2-10)式导出(4.2-13)式的步骤用到(4.2-15)式上，

就可得到方向 $(\boldsymbol{\Omega}, d^2\boldsymbol{\Omega})$ 体积为 $(\mathbf{r}, d^3r)$ 中能量为 (E, dE) 运动原子的平均数目，

$$n_0 F_r \frac{F_D(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, \mathbf{r})}{Ev|dE/dx|} dE \frac{d^2\Omega}{4\pi} d^3r \qquad (4.2\text{-}18)$$

用 $\mathbf{v} = v\boldsymbol{\Omega}$ 乘以 (4.2-18) 式即得靶原子的电流密度在能量 E 和方向 $\boldsymbol{\Omega}$ 上的微分

$$n_0 F_D(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, \mathbf{r}) \frac{\Gamma_s dE}{E|dE/dx|} \frac{\boldsymbol{\Omega} d^2\Omega}{4\pi} \qquad (4.2\text{-}19)$$

这个关系式可在各向同性极限下 $(E_0 \gg E)$ 求解各种几何条件溅射粒子通量的出发点。其思想是把靶表面埋在无限介质中并适当考虑表面束缚力以便求出通过该表面的通量。

(2) 平滑表面的背溅射产额

假定一个能量为 E 的离子以角度 θ 打到一平面上并取 x 轴沿着靶内表面的垂直方向(图 4.2-5)。大多数情况下，溅射通量的横向分布是不重要的。因此，通过靶表面 $x=0$ 处的靶原子向外电流可将 (4.2-14) 式积分获得。于是有

$$J(E, \Omega) dE d^2\Omega = n_0 F_D(E_0, \theta_0, 0) \frac{\Gamma_s dE}{E|dE/dx|} |\cos\theta| \frac{d^2\Omega}{4\pi} \qquad (4.2\text{-}20)$$

式中 θ 是 $\boldsymbol{\Omega}$ 和表面垂直方向之间的夹角(见图 4.2-5)。

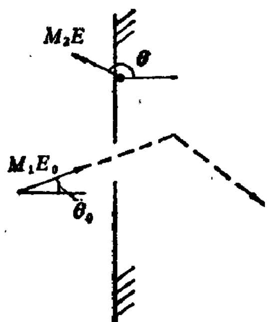


图 4.2-5 自具有平表面的半无限靶的背溅射

表达式 (4.2-20) 在 $E_0 = 0$ 处发散(见§2.2)。这完全是线性碰撞级联理论局限性。实际上，具有一定大小的级联中运动原子的数目不可能是无穷多的，因此不存在实际的发散。在钉扎理论(见下一节)中就不出现这种发散。

甚至在线性级联的情况下，只要在表面(或本体)加上束缚条件溅射通量就是有限的。令 $P(E, \theta)$ 是一个原子从表面逃出的几率。那么，将 (4.2-20) 式对

E 和 θ 积分并把溅射流除以入射流 n_i 即得溅射产额 Y

$$Y = \Lambda F_D(E_0, \theta_0, 0) \tag{4.2-21}$$

其中

$$\Lambda = \frac{\Gamma_s}{2}\int\frac{dE}{E|dE/dx|}\int d(\cos\theta)|\cos\theta|P(E,\theta) \tag{4.2-22}$$

上式中的 Λ 包含了靶材料的全部特殊性质，但不含有表征入射离子特性的任何参数。而 $F_D(E_0, \theta_0, 0)$ 则依赖于入射离子的类型、能量和方向，以及靶原子序数 Z_2、质量 M_2 和密度 N（见§2.2和§2.3）。

(4.2-21) 和 (4.2-22) 式首先由西格蒙德[1]推出。其主要假定是：第一，假定碰撞过程是线性碰撞级联，即 (4.2-4) 式成立，也即是说，在级联体积内只有靶原子的一小部分处于运动状态，并可能跑到表面（见图 4.2-1）。这种假定不适用于中等能量的大质量入射离子；第二，假定大的反冲级联仍能保证 (4.2-7) 和 (4.2-10) 式的可靠性和 (4.2-11) 式描写的低能通量的各向同性。一般来说，在低能（≲1 千电子伏），甚至是中能区域成立，但(4.2-7)式中离子和靶的质量差别大时，此假定也不成立；第三，靶表面的存在不对碰撞级联的发展有影响，但当低能或中能很轻离子打到重靶上及掠角（grazing）入射时此假定不适合；第四，在求解中包含着一系列弹性和非弹性散射的简化模型；第五，基本忽略本体束缚力；最后，忽略晶格结构的方向性效应。

金属表面束缚的最简单模型建立在表面位垒 U_0 的基础上，即

$$P(E,\theta) = \begin{cases} 1 & E\cos^2\theta > U_0 \\ 0 & E\cos^2\theta < U_0 \end{cases} \tag{4.2-23}$$

将 (4.2-23) 和 (2.2-37) 式代入 (4.2-22) 式得

$$\Lambda = \frac{\Gamma_s}{8(1-2s)}\cdot\frac{1}{NC_sU_0^{1-2s}} \tag{4.2-24}$$

式中

$$C_s = \frac{\pi}{2}\lambda_s a^2\left(\frac{M_1}{M_2}\right)^s\left(\frac{2Z_1Z_2e^2}{a}\right)^{2s} \tag{4.2-25}$$

λ_s 是参数 s 的无量纲函数，且从高能下 $s=1$ 的值缓慢变化到很

低能量下 $s\approx 0$ 的值(表 4.2-2). 在 (4.2-24) 式中已经用到反冲原子所进行的敲出碰撞是等质量事件,故

$$\frac{4M_1M_2}{(M_1+M_2)^2}=1.$$

表 4.2-2 λ_s 的值(4.2-25 式)

s	1.000	0.500	0.333	0.191	0.055	0.000
λ_s	0.500	0.327	1.309	2.92	15	24

(4.2-8)式 Γ_s 中的 s 是对应于低能碰撞,在(4.2-24)式中的 s 也是如此,因为 (4.2-22) 式分母中的量 $\left.\frac{dE}{dx}\right|_{E=U_0}$, 也即很低能量下一个反冲原子的阻止能力是占主要的. 由于能量 $E\gtrsim U_0$ 的散射截面无论在实践上还是原理上是个可疑量,所以在 (4.2-26) 式中插入 $s=0$ 的值,于是有

$$\Lambda=\frac{3}{4\pi^2}\frac{1}{NC_0U_0} \tag{4.2-26}$$

由 (4.2-25) 式得

$$C_0=\frac{\pi}{2}\lambda_0 a_{BM}^2 \tag{4.2-27}$$

其中 $\lambda_0\cong 24$, $a_{BM}=0.219$ Å, 是由低能原子间势 ("Born-Mayer") 决定的, 且 a_{BM} 的选取与 Z_2 无关, 这与 (2.2-11) 式不同. 可见, Λ 与表面束缚能 U_0 成反比. 对金属靶, 束缚能 U_0 接近于实验测得的升华能量;对共价键的靶,使键破裂的能量看作表面束缚能.

溅射产额 Y(4.2-21) 表达式中的第二个因子可以写成

$$\begin{aligned}F_D(E_0,\theta_0,0)&=\alpha(M_2/M_1,\cos\theta_0)NS_n(E)\\&=\alpha\left(\frac{dE}{dx}\right)_n\end{aligned} \tag{4.2-28}$$

其中 α 是入射角 θ_0. 质量比 M_2/M_1 和离子能量 E_0 的无量纲函数. 对于纯弹性散射和 (2.2-30) 式的指数散射, 在 F_D 中的长度单位是 E^{2s}/NC 和 x; 因此, 在 $x=0$ 处, F_D 像 S_n 那样依赖于 E_0.

无量纲参数 α 与 x 无关，不可能依赖于 E_0. 然而，电子阻止会使 α 随能量的增加而缓慢地减少，这种关系通过托马斯 (Thomas)-费米约化能量 ε_L [见 (2.2-14) 式] 表现出来.

图 4.2-6 给出因子 α 同质量比 M_2/M_1 之间的关系. α 随质量比 M_2/M_1 的增加而增加，其原因是随着离子质量的减小，大角散射事件的重要性增加了. 因此，在阻止能力相等的情况下，轻离子是更有效的溅射体. 除了低能 ($\lesssim$1 千电子伏)外，溅射产额的主要影响来自阻止能力同离子质量的依赖关系. 西格蒙德理论的 α 函数(图 4.2-6 中的虚线) 同实验数值的差别主要是在质量比大的情况，其原因是由于计算中忽略电子阻尼和采用无限大靶中有

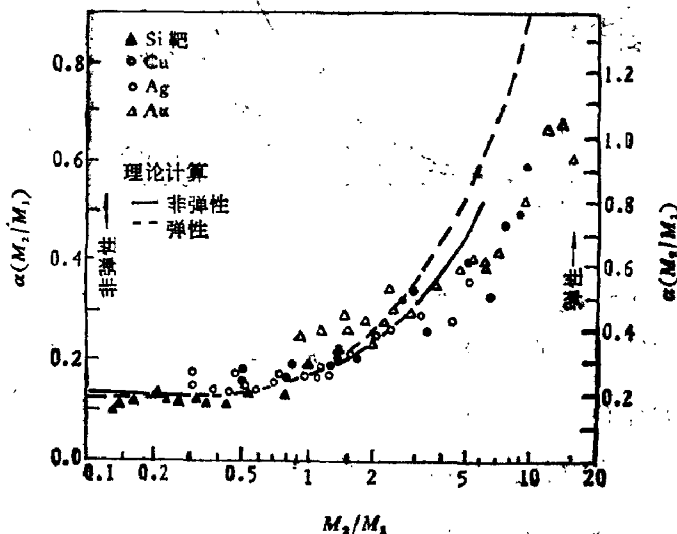


图 4.2-6 函数 $\alpha(M_2/M_1)$ 的理论和实验值[见参考文献 [9] 第 192 页]虚线是西格蒙德的结果，实线是温特玻考虑非弹性能量损失的修正

一个虚的表面. 对于轻的入射粒子，电子阻止能力等于甚至大于核阻尼能力. 温特玻 (Winterbon) 考虑这一因素之后，所得结果与实验值符合得更好. 另外，无限大靶的假定也使溅射产额的估计值过高，因为这样入射粒子可在虚靶表面来回穿行数次.

α 值随入射角 θ（除了掠角入射外）的增加而增加也是很明显的，因为接近表面 $x=0$ 处的能量沉积密度增加了，如图 4.2-7 所示.

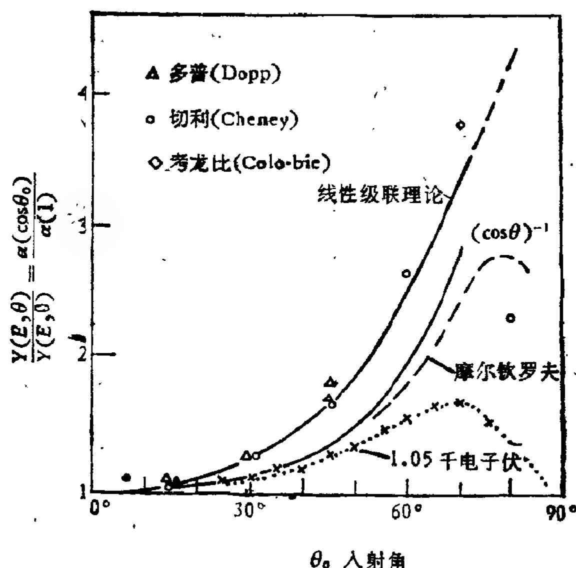


图 4.2-7 α 因子随入射角 θ_0 的变化. Ar 离子打到 Cu 上并作表面修正. [1]由西格蒙德理论得到 $\frac{Y(E,\theta)}{Y(E,\theta=0)}=\frac{\alpha(\cos\theta)}{\alpha(1)}$

由方程 (4.2-21) 和 (4.2-26) 得到溅射产额公式

$$Y(E_0,\theta_0,x)=\frac{0.042F_D(E_0,\theta_0,x)}{NU_0} \qquad (4.2\text{-}29)$$

这里，x 是入射粒子进入靶处溅射表面的深度（也即是说，背溅射时 $x=0$），E_0 是入射粒子的能量，θ_0 是入射角，$F_D(E_0,\theta_0,x)$ 是沉积能量的深度分布，U_0 和 N 分别是靶物质平均表面束缚能和密度. 如上所述，溅射产额正比于在表面淀积能量的必要条件是 $E_0\gg U_0$. (4.2-29) 式对于向前溅射和背溅射均是适用的. 当只考虑垂直入射的背散时，非弹性效应对溅射产额的影响很小，上式简化为

$$Y=\frac{0.042\alpha(M_2/M_1)S_n(E_0,Z_1,Z_2)}{NU_0} \qquad (4.2\text{-}30)$$

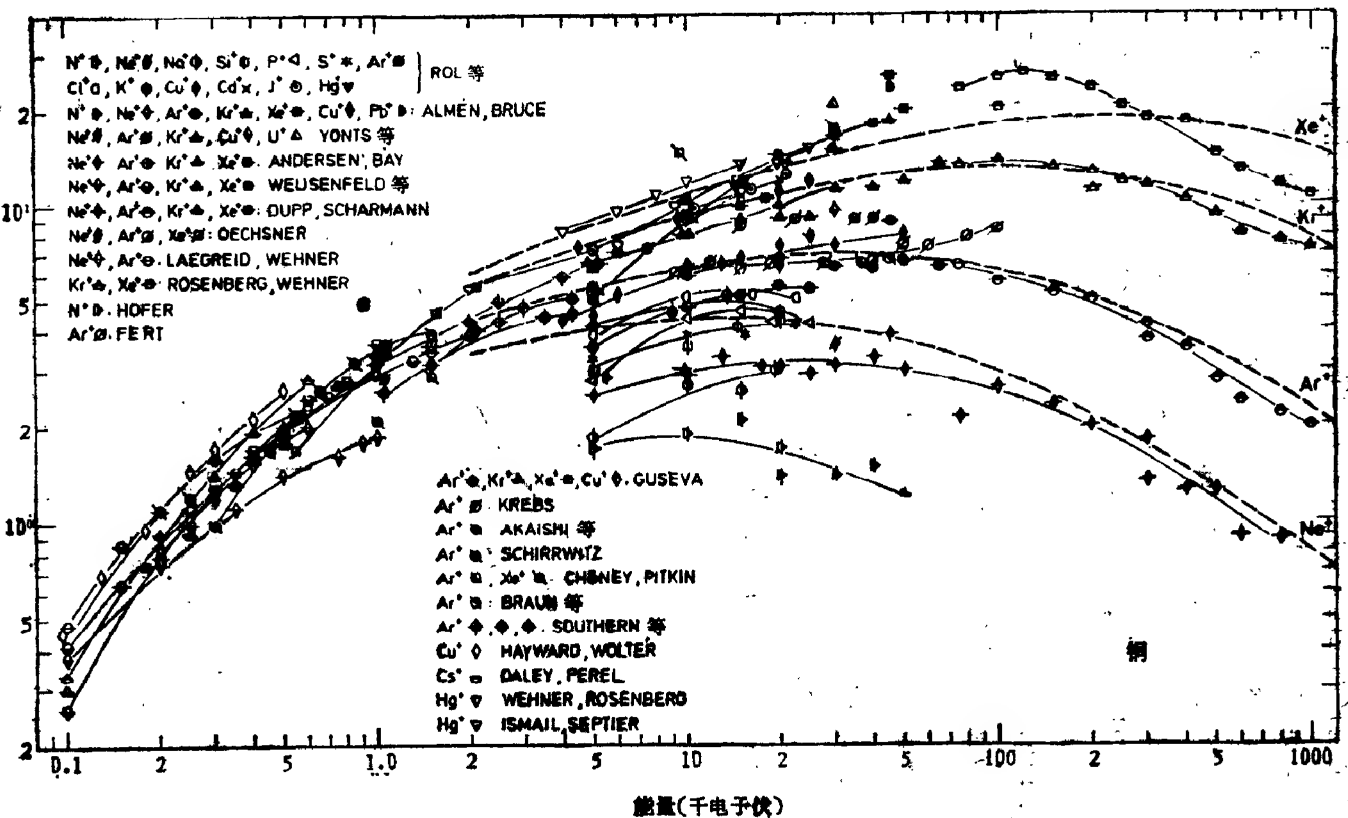


图 4.2-8 铜靶的实验溅射产额[9]虚线分别对应于入射粒子为 Ne^+, Ar^+, Kr^+ 和 Xe^+ 的溅射产额的理论曲线.

表明溅射产额正比于核阻止能力，实际表明它同能量的依赖关系。而且，通过（4.2-30）式可把理论预言同实验结果加以比较。例如，图 4.2-8 是各种入射离子（Ne^+、Ar^+、Kr^+ 和 Xe^+）对铜靶溅射产额的实验结果。四条虚线对应上述不同入射离子的理论溅射产额。由于氖、氩、氪和氙等入射离子可以忽略该离子注入样品中的化学效应，因此，理论和实验结果比较要好得多。其中氖和氩溅射的理论和实验结果符合很好。对于氪，在核阻止能力最大值附近，实验数据比理论预言的要高。至于氙，此效应更为突出。这种峰值效应在金的自溅射产额最为明显[9]。

(3) 溅射粒子能谱和角分布

现在我们从（4.2-20）式进一步讨论溅射粒子的能谱和角分布。（4.2-23）式所给出的平表面势包含着一个原子通过表面时受到折射，如图 4.2-9 所示。也即

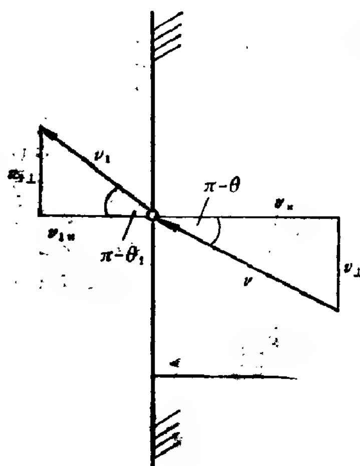


图 4.2-9　通过平面势垒时的折射效应．脚标 0 和 1 分别系指发射前后运动学参数（也即是，分别表示固体内外情况）

$$E_1\cos^2\theta_1 = E\cos^2\theta - U_0 \tag{4.2-31a}$$

$$E_1\sin^2\theta_1 = E\sin^2\theta \tag{4.2-31b}$$

从（4.2-31a）得，$E_1\cos\theta_1 d^2\Omega_1 = E_0\cos\theta_0 d^2\Omega_0$，故（4.2-20）式得到

微分溅射产额

$$d^3Y = F_D(E_0, \theta_0, 0)\frac{\Gamma_s}{4\pi}\frac{E_1 dE_1}{(E_1+U_0)^2|dE/dx|_{E=E_1+U_0}} \times |\cos\theta_1| d^2\Omega_1 \tag{4.2-32}$$

将 (2.2-39) 式变换后代入有

$$\frac{d^3Y}{dE_1 d^2\Omega_1} = F_D(E_0, \theta_0, 0)\cdot\frac{\Gamma_s}{4\pi}\cdot\frac{1-s}{NC_s} \cdot\frac{E_1}{(E_1+U_0)^{3-2s}}|\cos\theta_1| \tag{4.2-33}$$

若出射角 θ_1 一定，能谱在

$$E_1 = (E_1)_{max} = \frac{U_0}{2(1-s)} \tag{4.2-34}$$

处呈极大值（见图 4.2-10）。而且，溅射粒子能谱中观察到极大值的位置在线性级联范围内只同靶表面性质有关，而同离子的类型和能量无关。

汤姆孙 (Thompson)[13] 假定在碰撞级联倍增过程中，每一个初反冲产生二次反冲，速度减慢，其能量损失主要是核阻止，且刚性离子的能量损失是

$$\frac{dE}{dx} \cong E/D \tag{4.2-35}$$

式中 D 是最近邻的距离，其数值为 $D = \frac{1}{N^{2/3}}$. 得到类似于 $s = 0$ 的 (4.2-33) 式的溅射产额

$$\frac{d^2Y}{dE_1 d^2\Omega_1} = \frac{ND}{4\pi E^2} T d\sigma |\cos\theta_1| \tag{4.2-36}$$

$E_0 = E_1 + U_0$，采用汤姆孙相互作用势

$$V(r) = \frac{2E_R}{e}(Z_1 Z_2)^{5/6}\left(\frac{A_0}{r}\right)^2$$

及 $E_R = 13.6\text{eV}$*) 和 $A_0 = 0.53\text{Å}$ 来估计微分截面 $\frac{d\sigma}{dT}$，得到溅射

*) 里德伯 (Rydberg) 能量，见 § 1.3。

产额同入射角 θ 的关系

$$Y = \frac{\pi^2 a_0^2 N^{2/3}}{8e} \frac{E_R}{U_0} \frac{M_1(Z_1 Z_2)^{5/6}}{(M_1 + M_2)} \sec\theta_0 \qquad (4.2\text{-}37)$$

说明溅射产额与束缚能成反比关系. 至于同入射角 θ_0 的关系,在 $\theta_0 \lesssim 60°$ 时, 已经观察到 Y 同入射角 θ_0 的余弦成反比 (见图 4.2-7), 其中

$$\frac{Y(E_1, \cos\theta_0)}{Y(E, 1)} = (\cos\theta_0)^{-1}$$

对应单散射理论,一般情况有:

$$\frac{\alpha(\cos\theta_0)}{\alpha(1)} = (\cos\theta_0)^{-\frac{5}{3}}.$$

然而(4.2-35)式只有在很低能量 (≪100 电子伏) 范围才可作为指数定律 (2.2-39) 式的合适近似. 在(4.2-33)式中由于指数 s 的存在使能谱带有不确定性,因为 s 可从 $E_1 \sim 1$ 千电子伏时的 0.2—0.3 变到 $E_1 \sim U_0$ 时接近于零,所以,能谱同 E_1 的变化关系会有别于

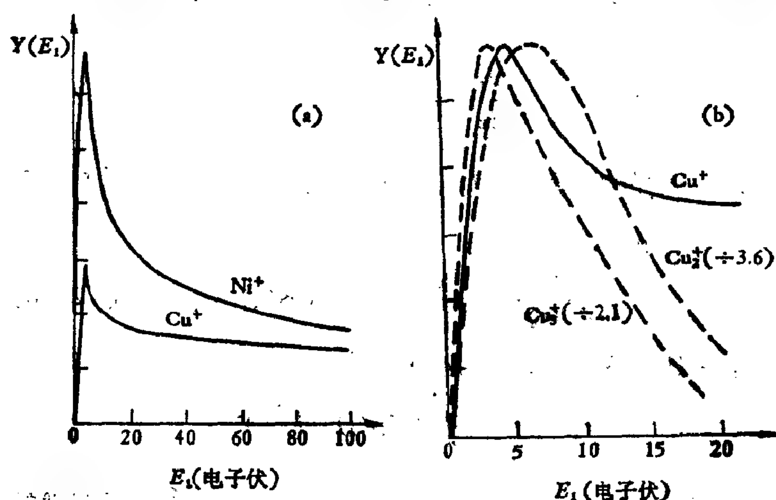


图 4.2-10 溅射离子的能谱图 (6千电子伏 Ar^+ 轰击多晶金属靶)[14]

(a) 多晶镍和多晶铜靶产生 Ni^+ 和 Cu^+ 的能量分布;

(b) 溅射铜离子能谱中低能部分的放大,虚线给出发射的铜离子簇

(4.2-36) 式所给出的 E_1^{-2} 规律.

正如 (4.2-33) 式和 (4.2-34) 式所预言的，实验上观察溅射离子的能谱，在几个电子伏特 (~5 电子伏) 的位置确具有极大值，然后跟着一个很长的尾巴，一直延伸到几百电子伏特，甚至上千电子伏特. 图 4.2—10 (a) 是 6 千电子伏 Ar^+ 轰击多晶铜和镍靶，得到 Cu^+ 和 Ni^+ 的能量分布. 图 4.2—10(b) 是铜靶溅射粒子(带电)低能部分的放大能谱图，可以看出不仅有单原子离子 Cu^+，而且出现多原子构成的离子簇 (ion cluster)[7]，Cu_2^+ 和 Cu_3^+，它们的能量分布与 Cu^+ 不同，在最大值后很快下降，其强度分别是 Cu^+ 的 1/3.6 和 1 /2.1.

实验测量中性溅射粒子的能谱要困难得多，常采用飞行时间分析器[23]. 就最大值位置而言，中性粒子的能谱类似于溅射离子能量分布图，如图 4.2-11[25]. 但是，在能量分布中快离子的相对比例远大于快中性原子的相对比例. 并且，在超过最大值的"中"能和"高"能区域离子的能量分布近似正比于 $E_1^{-1.5}$，而这个区域

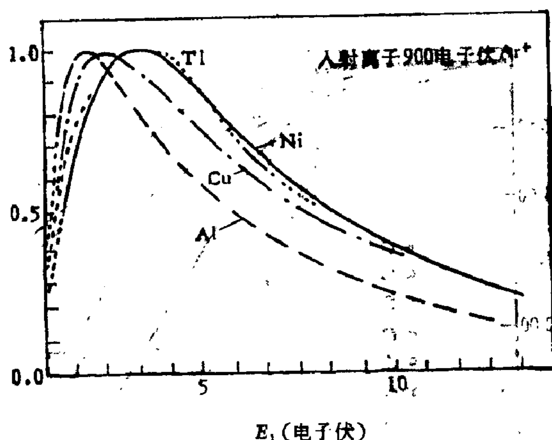


图 4.2-11 900 电子伏的 Ar^+ 离子垂直入射到各种多晶金属靶溅射出中性粒子归一的能量分布[15]，E_m 是最可几发射能量

中性原子的能量分布随 E_1^{-2} 变化，所以离子平均能量的数量级是 100—200 电子伏，而中性原子的平均能量是 10 电子伏.

采用离子微分析器的静电镜[14]可分析低能离子(从 0 到 20 电子伏，精度可达 5×10^{-2} 电子伏). 发现离子能谱要比中性粒子能谱变化多得多. 图 4.2-11 中的 Ti 和 Ni 谱几乎一样，但离子谱却差别很大. 图 4.2—10(a) 中的 Cu^+ 和 Ni^+ 溅射离子能谱，低于 20 电子伏时，两者差别很大；但随着能量 E_1 增加，两者逐渐靠近. 实验上发现这两种发射之间的关系为

$$\frac{Y(Cu^+)}{Y(Ni^+)}=0.72\exp\left(-\frac{1700}{v}\right) \qquad (4.2-38)$$

v 是溅射原子的速度. 由于这些金属的中性原子发射不存在重大的差别，显然溅射离子能谱的差别是同电离过程密切相关的.

若干年来，关于带正电分量的能谱做了不少工作，采用迟豫场或磁分析方法进行的. 然后用电离几率把能谱卷积，以便同理论比较. 对于溅射负离子能谱做得较少而且结果分散很大. 但仍存在一个明显的趋势，即轻的靶原子（C^-、Si^- 和 Al^- 等）随能量变化较慢，而重原子的靶（Cu^-、Ge^- 和 Au^-）随能量变化较快（图

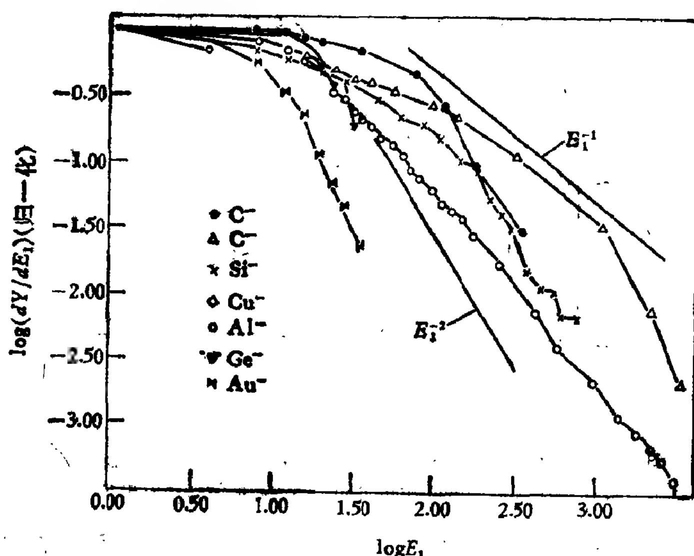


图 4.2-12　40 千电子伏 Ar^+ 离子轰击下自靶发射出负离子的能量分布[16]

4.2-12)。这同理论预言一致。人们用溅射粒子过电离来解释。对碱金属电离是热运动发生的，或者是在等离子体中发生，当入射粒子能量足够高，谱线呈 E_1^{-2} 规律。

方程（4.2-33）表明溅射通量的角分布遵从余弦定律，是在各向同性通量近似下得到的。利用图 4.2—13 的角参数，在立体角 $d\Omega_1$ 中发射离子的数目可用朗伯（Lambert）规律来表示

$$\frac{dY^+}{d\Omega_1}=\frac{Y_\perp^+}{\cos\theta_0}\cos\theta_1 \qquad (4.2\text{-}39)$$

$Y_\perp^+$ 是 $\theta_0=0$（即垂直入射）时垂直于表面每个立体弧度内所发射的粒子数。

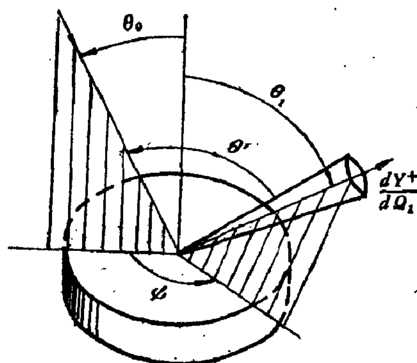


图 4.2-13　入射和溅射离子的角参数。

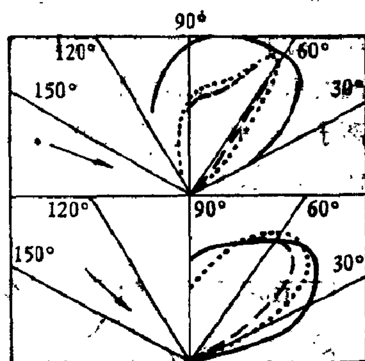


图 4.2-14　8千电子伏 Rb^+ 离子轰击多晶铜靶时，Cu^+ 离子的角分布[17]

事实上，不同的金属靶溅射离子的角分布是不同的，而且同入射方向有关，考虑到这一因素，得到如下半经验公式：

$$\frac{dY^+}{d\Omega}=\frac{Y_\perp^+}{\cos\theta_0}\cos\theta_1\frac{1-\lambda\cos\theta'}{1-\lambda} \qquad (4.2\text{-}40)$$

其中 $\cos\lambda=\cos\theta_0\cos\theta_1+\sin\theta_0\sin\theta_1\cos\phi$。且

当 $\lambda=0$ 时，(4.2-40)式就退化为(4.2-39)式；

$\lambda<0$ 时，相当于过余弦分布；

$\lambda>0$ 时，对应于不足的余弦分布。

例如，初离子束能量为 8 千电子伏，许多过渡金属（Ni 和 Cu）的 λ 在 0.3-0.4，而铝则是 0.2. 偏离余弦分布主要是由于高能离子，如图 4.2-14. （4.2-39）式对低能离子是实用的（约低于 30 电子伏）它可用于研究离子微探针技术中仪器设备的光学性质.

当然，偏离余弦规律还有其它原因. 如表面修正，表面粗糙效应和各向异性的修正，以及多晶靶结构的影响. 这些我们将在下一节讨论. 离子轰击单晶表面得到溅射粒子的分布有很强的各向异性. 例如，8 千电子伏 K^+ 离子轰击铝（100）面，沿〈100〉和〈$\bar{1}$11〉晶轴方向观察到突出的 Al^+ 离子发射（见图 4.2-15）. 详细讨论各向异性是一个很复杂的问题[9]：有些发射离子的优势并不在轴的方向，而且同溅射离子的能量有关，如图 4.2-16 所示，用 Ar^+ 离子轰击 Ni 单晶（100）面，记录发射角为 45° 处一个圆锥内发射出不同能量的 Ni^+ 离子，发现对应于〈$\bar{1}$10〉方向发射低能离子（< 40千电子伏）的极大位置变成对高能离子（80，100 电子伏…）的极大.

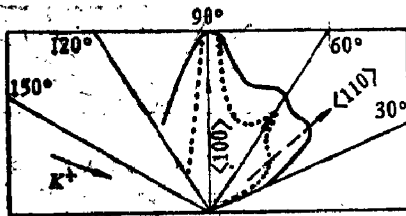


图 4.2-15　8 千电子伏 K^+ 离子轰击铝单晶（100）面发射 Al^+ 离子的角分布. 实线为 8 电子伏，虚线为 100 电子伏[17]

这些结果说明发射离子的角分布不能只考虑由于碰撞级联的聚焦引起各向异性来解释，还必须考虑发射离子在表面原子上的弹性散射过程. 从分析应用的角度看，由于分析溅射离子的角分布和能谱比溅射的中性粒子容易得多，因此，研究离子发射是仔细研究固态表面原子发射过程的强有力工具.

现在来讨论一下表征溅射过程的有关深度. 从方程（4.2-28）来看，溅射通量可分成由离子（和高能反冲原子）慢化确定部分和代表溅射原子谱性质另一部分组成，因此，至少要处理两个联系不紧的深度变量.

考虑溅射原子产生的深度范围，把溅射原子的能谱区分成不同的部分也许有用．按照(4.2-20)式和(2.2-39)式，可以得每个

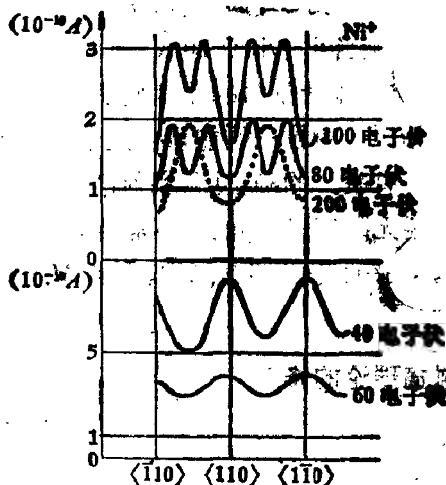


图 4.2-16 当入射角为 45° 在晶体 (100) 面轰击出 Ni^{+} 离子电流随出射角和发射粒子能量的变化

能量超过任意最小能量 $E(E \gg U_0)$ 的入射粒子发射原子的平均数目是

$$Y(E) \cong \frac{\Gamma_s}{4} \frac{1-s}{1-2s} \frac{E^{2s}}{NC_s} \frac{F_D(E_0, \theta_0, 0)}{E} \qquad (4.2\text{-}41)$$

上式对半个球积分得到的．同(4.2-7)式比较可得

$$Y(E) \cong \frac{1}{4} \cdot \Gamma_s \frac{F_D(E_0, \theta_0, 0)\Delta x}{E} \qquad (4.2\text{-}42)$$

式中 $\Gamma_s F_D \Delta x / E$ 是能量大于 E 的每个离子在深度间隔 $(0, \Delta x)$ 内产生运动原子的数目，系数 1 / 4 代表对整个半球取平均的余弦因子，它表明并不是所有已经运动的原子，其运动方向都是指向表面向外的垂直方向．显然，

$$\Delta x_0 \cong \frac{1-s}{1-2s} \frac{E^{2s}}{NC_s} \qquad (4.2\text{-}43)$$

是这些原子出现深度的量度．由此看来，似乎溅射原子的能量愈

高，愈是从靶内较深处放出来．这个令人惊奇的结果也是反冲原子能谱中朝着小能量 E 方向有一个很强的向前峰的直接结果，如(4.2-10)式． 当 E 接近于 U_0 时，上述估计会因表面束缚能而修正．粗略地说，Δx 相当小（小于 10 Å）且对能量不灵敏．

相反， 表征淀积能量剖面的深度变量 x 的数量级是 $\sim E^{2u}/NC$，也即是，依赖于入射粒子的能量．这个量的重要性在于它同薄层或化合物溅射有关．的确，从背溅射出发，要考虑多薄的薄片行为可以看作是半无限靶，精确的计算需要知道质量比，即当 M_2/M_1 的比值高时，x_0 接近平均穿透深度，而当 $M_2/M_1 \lesssim 1$ 时 x_0 比较小．

五 简单级联碰撞理论的修正

(1) 本体束缚力

至此，还没有考虑本体束缚力．在上面的简单图象中，只要有很小的能量就可以使一个原子发生运动并参加级联．这个图象物理上是不合理的，在接近晶格束缚能，也即几个电子伏特时就不适用了．但是，如果这个低能原子能克服数量级差不多的表面位垒则会对溅射有贡献．因此，晶格束缚能 W 的主要作用是在慢化过程中从级联吸收能量．把(4.2-7)式加以推广到包含这种吸收过程：

$$N(E_0, E) \sim \Gamma_s \frac{E_0}{E + (2-s)W} \tag{4.2-44}$$

其中 $E \gg W$．

早期理论把本体束缚能 W 看成使晶格永久性位移的阈能数量级 E_d 差不多． 这个能量常常高于 U_0． 如果这个假定是合理的，表面势垒对溅射影响就不重要了．在其它参数不变的情况下，产额应小，大约是 U_0/E_d 倍．但是，位移阈能 E_d 主要是使一间隙性原子远离空穴晶格位置，使其不再能够复合，如图 4.2—17． 临界距离 r_c 可以远远超过原子发射的深度范围 Δx． 这样，一个原子既使在初能量小于 E_d 时也容易溅射出来．所以，假定 E_d 在求溅射产额中不重要是合理的．

从(4.2-18)式和(4.2-44)式容易估计出束缚能W对溅射原子产额和能谱的影响. 结果,(4.2-33)式的能谱修正为

$$\frac{E_1}{(E_1+U_s)^{3-2m}} \rightarrow \frac{E_1}{(E_1+U_s+W)(E_1+U_s)^{2-2m}} \quad (4.2\text{-}45)$$

式中的峰值向高能方面移动了[同(4.2-34)式给出的峰位相比]. 当然,相应于(4.2-45)式的总产额要比(4.2-24)式预言的小.

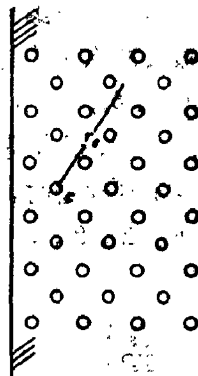


图 4.2-17 位移阈能E_d的定义. 在c点的原子需要得到最小反冲能量E_d以产生稳定的空位-间隙对. 从简化图象来看,这意味着在半径为r_c的球外形成一个间隙原子,而在c处有一个空位. 复合体积$4/3\pi r_c^3$在金属中含有100—200个原子位置. 实际上,E_d和复合体积是各向异性的

(2) 半无限靶的背溅射

一个靶表面对碰撞级联的影响在一定程度上类似于无限空间中一个吸收墙对扩散剖面的影响. 而一个吸收墙又可用一负号的镜象源模拟,以保证在靶表面处的粒子密度为零. 因此,通过一个完全吸收墙的通量是通过一有限介质的等效参考平面通量的两倍. 由于运动粒子慢化过程使得用无限介质预计溅射通量同半空间的差别不大. 它不同于扩散过程,粒子运动时损失能量不可能在靶表面来回穿行很多次. 这里讨论三种不同的表面效应:

(i) 一个均匀地各向同性低能原子流同一个实际靶表面相交,忽略束缚能;

(ii) 由于接近表面处沉积能量的不均匀性;使低能通量也具有不均匀性;

(iii) 在表面处介质"吸收"高能粒子而使碰撞级联截止.

上述前两项彼此互补. 在第(i)项中,令$x=0$处为表面且假定低能原子分布是均匀的各向同性的,即在接近靶表面和$0\leqslant x\leqslant x_1$区域内是$\rho(E)dEd^2\Omega/4\pi$,其中$x_1\gg\Delta x$,而$\Delta x$是溅射原子发射的深度如(4.2-43)式. 根据(4.2-5)迁移方程的线性特点,

一个吸收表面的影响可以用映象密度的相加来模拟

$$\rho_{im}(E) = -\rho(E) \quad 当 x \leqslant 0 \tag{4.2-46}$$

这使 $x=0$ 处的总密度为零，并且向外方向的总通量增加了两倍.

第 (i) 项这种效果为第 (ii) 项的作用所补偿，因为在第 (ii) 项中通量在接近表面处不是均匀的，甚至在无限介质中也是如此，如图 4.2-18 所示. 由于撞击离子在 $x=0$ 处开始弥散能量，能量损失是深度的函数，且在 $x=0$ 处是不连续的. 而这种不连续性被反冲原子的能量迁移弄得模糊不清. 在决定淀积能量分布 $F_D(E_0, \theta_0, x)$ 中没考虑这种模糊的数量级 Δx，因为 E 在这里取零. 因此，正常情况下计算的 F_D 分布在 $x=0$ 处呈现不连续性. 但在出现模糊时，$F_D(E_0, \theta_0, x)$ 的形状如图 4.2-18(b) 所示. 此时 $F_D(E_0, \theta_0, x)$ 的值大约是没有修正值的一半.

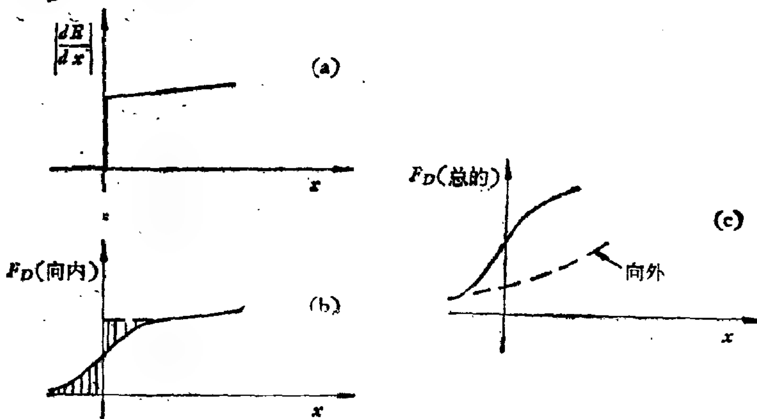


图 4.2-18 无限介质中接近平面 $x=0$ 处的能量沉积. (a) 阻止能力，即初能量淀积同始于 $x=0$ 处向内运动穿进深度的关系；(b) 由一个向内运动离子淀积的能量. 与 (a) 的区别是反冲原子能量耗散引起的；(c) 背散射离子通过 $x=0$ 处向外运动时总能量淀积(包括能量耗散)

因此，当入射粒子淀积了全部能量时，(i) 和 (ii) 项的修正趋于相消，并且决定溅射产额淀积能量的值是 $F_D(E_0, \theta_0, x \to 0_+)$.

当然，这种说法并不适用于背散射离子和高能发射反冲原子都对能量淀积作贡献的情况，因为这些粒子在无限介质中 $x=0$

的平面两边都淀积能量. 故使 (i) 和 (ii) 效应的作用只是部分相消.

第 (iii) 个修正是出于作用在无限介质的 F_D 和作用在半无限介质的 $F_{D,0}$ 之间的差别. 讨论这个问题类似于离子反射系数. 令每个离子从半无限靶发射反冲原子的通量是 $Y_0(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E, \boldsymbol{\Omega}) dEd^2\boldsymbol{\Omega}$, 和反射离子的通量是 $R_0(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E, \boldsymbol{\Omega}) dEd^2\boldsymbol{\Omega}$. 于是, 对于 $x \geqslant 0$ 的情况 F_D 可以分解成如下的贡献:

$$F_D(E_0, \theta_0, x) = F_{D,0}(E_0, \theta_0, x)$$
$$+ \int Y_0(E_0 \boldsymbol{\Omega}_0 E, \boldsymbol{\Omega}) dEd^2\Omega F_{D,r}(E, \theta, x)$$
$$+ \int R_0(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E, \boldsymbol{\Omega}) dEd^2\Omega F_D(E, \theta, x) \quad (4.2\text{-}47)$$

其中 $F_{D,r}$ 是一个反冲原子在一无限介质中的能量淀积函数. 令 $x = 0$, 则有

$$F_D(E_0, \theta_0, 0) = F_{D,0}(E_0, \theta_0, 0) + Y_0\langle F_{D,r}\rangle$$
$$+ R_0\langle F_D\rangle \quad (4.2\text{-}48)$$

Y_0 和 R_0 是半无限介质中的溅射产额和离子反射系数, 平均记号 $\langle\ \ \rangle$ 是对半无限介质的溅射原子和反射离子的角度和能谱进行平均. 用 Λ 相乘并考虑 (4.2-21) 式, 可得到

$$Y_0 = \frac{Y - R_0\langle Y\rangle}{1 + \langle Y_r\rangle} \quad (4.2\text{-}49)$$

其中 Y_0 和 Y 分别是半无限和无限靶的溅射产额, Y_r 是无限靶的自溅射产额*).

(4.2-49) 关系式至今还未作定量处理, 主要困难是涉及到需知道较高能量下反射和溅射粒子通量的角度和能量关联, 因为值 $\langle Y\rangle$ 和 $\langle Y_r\rangle$ 是由这部分谱决定的. 由 (4.2-49) 式的分子可看出其定性的趋势. 显然, 当反射系数 R_0 大, 特别是在反射粒子谱朝着初能量方向有一个向前的峰, 第二项就会消去第一项, 从而使溅射产额 Y_0 很小. 这是从阻挡方向入射 (即, $\theta \to 90°$) 所获得

---

*) (4.2-48) 式中第二项 $F_{D,r}$ 和第三项 F_D 通过 $x = 0$ 是连续的.

的情形，如图 4.2-19 所示. 没有修正过的溅射产额 Y 应趋于某一个修正值,一般情况下这个值大于 $Y(\theta=0)$ (见图 4.2-20). 这样，Y_0 经过最大值并随着入射角的增加而趋于零. 图 4.2-19 定性地给出了这个特性. 然而，(4.2-49) 式所描述的特性只适合于靶表面很平的情况，而分析实验结果往往都要考虑靶表面并不很平.

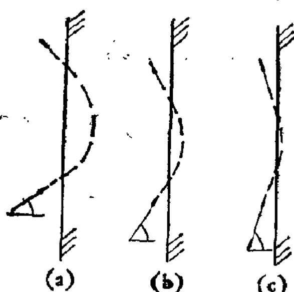


图 4.2-19　多次碰撞的离子反射，随着入射角 θ_0 的增加 [从 (a) 到 (c)]，反射几率也增加，而在靶内所走过的平均路程长度和能量损失随之减小

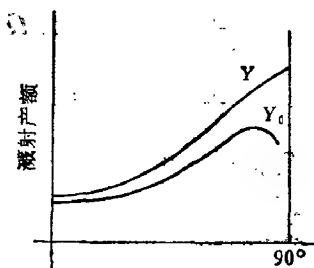


图 4.2-20　离子反射时修正的 (Y_0) 和未修正的 (Y) 溅射产额示意图

除了溅射产额的角关联很重要以外，表面效应在分析质量比 M_2/M_1 和能量关系时也影响到垂直入射的溅射产额. 例如，由于 R_0 随 M_2/M_1 的增加而增加,比率 Y_0/Y 减少. 这一点同实验结果定性符合.

(4.2-49) 式的分母有些不同的特点,它对 Y_0 的影响比分子的影响小,使 Y_0 相对于 Y 因质量比减少和入射角增加而略有减小.

(3) 各向异性的修正

到现在为止，我们在处理溅射问题中最重要的简化是 (4.2-19) 式所表达的低能反冲原子通量的各向同性. 只要这个表达式成立,溅射粒子的角分布和能量分布均同离子的类型、能量和入射

角无关，而且溅射产额随离子类型、能量和入射角的变化均由靶参数 Z_2 和 M_2 决定，但同表面束缚能和其它参数没有直接影响.

实验证明，在能量为几个千电子伏特的区域，溅射通量显著地偏离各向同性的特点，甚至在能量 E 比 U_0 大许多的情况下也是如此. 当然，对于钉扎 (Spike) 和轻离子溅射也会有大的偏离.

反冲通量的各向异性直接同入射粒子的动量有关. 在最简单的情况下，也即忽略本节中所提到的其它修正因素时，可把 (4.2-18)推广到反冲原子在相空间的密度

$$n_i \frac{\Gamma_s}{4\pi} \frac{dE}{v|dE/dx|} d^2\Omega d^3r \left(\frac{F_D(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, r)}{E} + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \frac{\boldsymbol{F}_P(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, \boldsymbol{r})}{\sqrt{2M_2E}} \right) d^2\Omega \tag{4.2-50}$$

式中 $\boldsymbol{F}_P(E_0, \boldsymbol{\Omega}_0, \boldsymbol{r})d^3r$ 是一个初能量 E_0 方向 $\boldsymbol{\Omega}_0$ 的入射离子淀积在 $(\boldsymbol{r}, d^3r)$ 的平均动量. 动量分布要比能量淀积剖面 F_D 复杂得多. 它是一个矢量，一般情况下，至少有平行于入射离子的分量改变符号(图 4.2-21)[17].

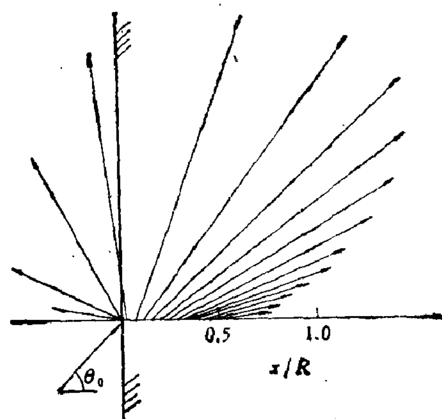


图 4.2-21　入射角 $\theta = 45°$ 和质量比 $M_2/M_1 = 1.5$ 且为弹性散射的情况计算沉积动量密度 $F_P(E_0, \Omega_0, x)$. $s = 1/2$，深度单位是指平均路径长度，每根矢量的原点是在$(x, 0)$，x 是 $F_P(E_0, \Omega_0, x)$ 特定的深度，方向为 x 处的 F_P 的方向，长度标度由 $\int_{-\infty}^{\infty} F_P(E_0, \Omega_0, x)dx = M_1v$

在(4.2-50)式适用的范围内,通过平面的通量是

$$n_i \frac{\Gamma_s}{4\pi} \frac{dE}{|dE/dx|} |\cos\theta| d^2\Omega \left(\frac{F_D(E_0, \theta_0, 0)}{E} + 3 \frac{\Omega_0 \cdot F_P(E_0, \Omega_0, 0)}{\sqrt{2M_2E}} \right) \tag{4.2-51}$$

这里可以得到如下的各向异性修正:

(i) 使溅射通量偏离简单的余弦关系;

(ii) 使溅射粒子的能谱进一步复杂化;

(iii) 消除了高能粒子和低能粒子慢化特征之间的简单退移关系;

(iv) 给出偏离各向同性极限的数量级是 $(M_1E_0/M_2E)^{1/2}$.

一个运动的入射粒子在运动方向上动量的平均损失是

$$\frac{dP}{dx} = \frac{1}{v_0} \frac{dE_0}{dx} \tag{4.2-52}$$

而且, $F_P(E_0, \Omega_0, 0)$ 可分解成

$$F_P(E_0, \Omega_0, 0) = \frac{1}{v} NS_n(E_0) \cdot (\alpha_{\parallel} \hat{e}_x + \alpha_{\perp} \hat{e}_\rho) \tag{4.2-53}$$

其中 $\hat{e}_x$ 和 $\hat{e}_\rho$ 分别是垂直和平行于表面的单位矢量, $\alpha_{\parallel}$ 和 $\alpha_{\perp}$ 类似于(4.2-28)式的 α, 是无量纲的量, 但可以取负号. 在垂直入射时, $\alpha_{\parallel}$ 一般为负,这样,由于溅射粒子角分布变窄能谱变宽致使各向同性通量作正的修正.

采用(4.2-26)近似式,各向异性的溅射产额可修改为

$$Y(\theta = 0) = NS_n \cdot (\Lambda\alpha + \Lambda'\alpha_{\parallel}) \tag{4.2-54}$$

$$\Lambda' = \frac{9}{2\pi^2 NC_0(\gamma E_0 U_0)^{1/2}} \tag{4.2-55}$$

$$\gamma = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \tag{4.2-55a}$$

这些结果只能看作趋势,不能作为定量的预言.这是因为: 第一,要处理用 $(M_1E_0/M_2E)^{1/2}$ 展开而收敛很慢的级数; 第二,需解决前面所讲的各种修正,特别是表面修正,这些修正对动量剖面还没有探讨过;第三,就是在现在这种简化图象中, 考虑动量分布的

详细情况仍有许多不确定性.

对初能量为千电子伏离子溅射过程进行蒙特-卡罗模拟,研究一些特定系统对各向同性溅射极限的偏离，发现碰撞级联中属于高阶的溅射原子（一般具有最低能量）的发射特征遵从余弦定律，而较低阶的溅射原子在束流方向呈现各向异性. 除了表面垂直方向,束流方向起着第二个参考轴的作用,如(4.2-51)式.

(4) 低能离子和轻离子溅射的半经验公式

线性级联理论(4.2-30)式在许多情况下给出了与实验较为符合的结果（如图 4.2-6).但另一些实验结果与其有明显的偏离.例如，低能离子溅射和轻离子溅射属于图 4.2-1a的单撞击 (Single-Knockon) 方式的溅射. 此时，西格蒙德的理论框架仍然可以作为解释这些溅射的参考. 马佐拉米 (Matsunami) 在考虑阈能效应后给出低能重离子溅射产额的半经验公式[19]

$$Y = 0.42\frac{\alpha(M_2/M_1)}{NU_0}(S_nE)\left[1-\left(\frac{E_{th}}{E}\right)^{1/2}\right] \quad (4.2\text{-}56)$$

式中 $E_{th}=\xi U_0$ 是溅射阈能，且 α、S_n 和 E_{th} 可按下式进行计算

$$\alpha = \begin{cases} 0.1019 + 0.0842(M_2/M_1)^{0.9805}, & M_2/M_2 < 2.163 \\ 0.4137 + 0.6092(M_2/M_1)^{0.1708} & M_2/M_1 > 2.163 \end{cases} \quad (4.2\text{-}56a)$$

$$S_n = \begin{cases} 3.44(\varepsilon_L)\log(\varepsilon_L + 2.718) \\ 1 + 6.355(\varepsilon_L) + \varepsilon_L[-1.708 + 6.882)(\varepsilon_L)] \end{cases} \quad (4.2\text{-}56b)$$

$$\xi = \begin{cases} 4.143 + 11.46(M_2/M_1)^{0.5001} & M_2/M_1 < 3.115 \\ 5.809 + 2.791(M_2/M_1)^{0.4816}, & M_2/M_1 > 3.115 \end{cases} \quad (4.2\text{-}56c)$$

其中 ε_L 是林哈德约化能量,由(2.2-14)式给出，ξ 为相对阈能.

从物理上说，(4.2-30)式的线性级联理论包含着反冲原子速度分布是各向同性的假设. 而在低能重离子溅射情况下，反冲原子在其被溅射之前只经过少数几次碰撞，因而其速度分布是非各向同性的. 这类似于(4.2-54)式所示的情况.

对于轻离子必须考虑非弹性阻尼，其溅射产额的经验公式为[20]

$$Y = 0.042\,\frac{\alpha(M_2/M_1)}{NU_0}\,\frac{S_n(E)}{1 + 0.35U_0S_e(\varepsilon)}\left[1 - \left(\frac{E_{th}}{E}\right)^{1/2}\right]^2$$

(4.2-57)

其中 $S_e(\varepsilon)$ 是林哈德电子阻止截面，由 (2.3-34) 式表示. 最佳符

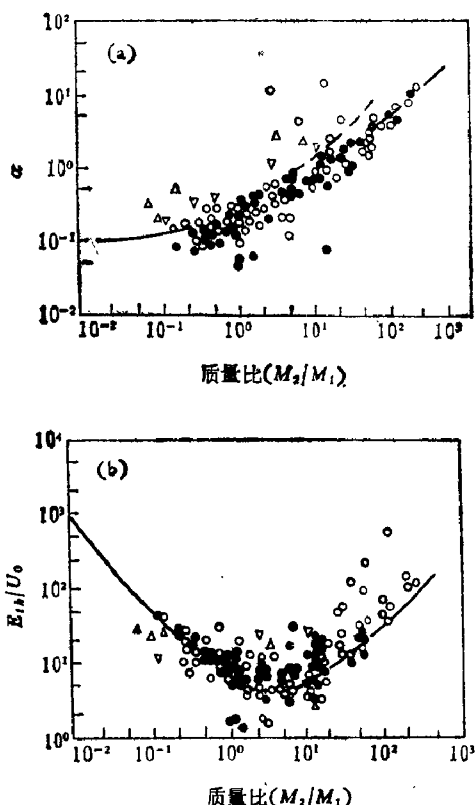


图 4.2-22 (a) α' 参数(方程 4.2-57 b) 同质量比的关系. 虚线是西格蒙德 α 的结果(见图 4.2-6)

(b) 相对阈能 $\xi = \frac{E_{th}}{U_0}$ 与质量比的关系，曲线是方程 (4.2-57c)[20]

合 $\alpha(M_2/M_1)$ 的形式是

$$\alpha = Q(Z_2)\alpha'(M_2/M_1) \tag{4.2-57a}$$

$$\alpha' = \begin{cases} 0.10 + 0.155(M_2/M_1)^{0.73} & M_2/M_1 < 50 \\ 0.321 + 0.0332(M_2/M_1)^{1.1} & M_2/M_1 > 50 \end{cases} \tag{4.2-57b}$$

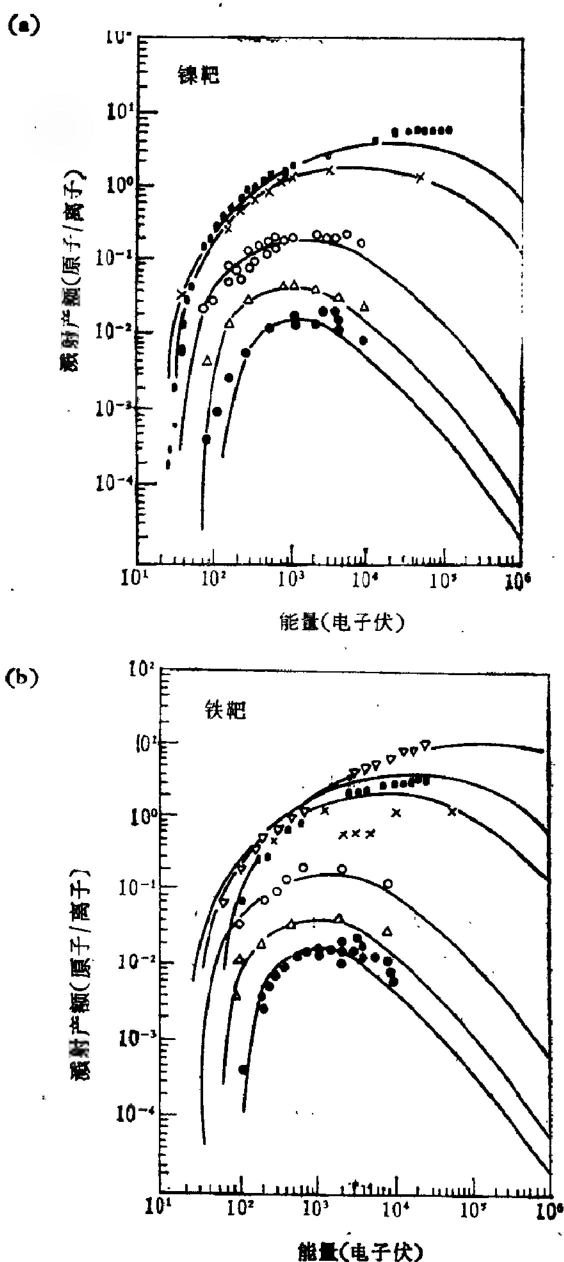


图 4.2-23 方程(4.2-57)分析表达式同镍(a)和铁(b)靶溅射产额测量值比较[30]

$$\xi' = \frac{E_{th}}{U_0} = 1.5[1 + 3.8(M_2/M_1)^n]^2/\gamma \tag{4.2-57c}$$

其中 $Q(Z_2)$ 为对各种靶材料 α 与 α' 的平均偏差．当 $M_2/M_1 > 1$ 时 $n = 0.834$，当 $M_2/M_1 < 1$ 时，$n = 0.18$．图 4.2-22 中的三角形▽和△分别对应于铍和碳靶．点为元素周期表中 IV 族元素，圆圈对应于其它元素的靶物质．曲线则分别对应于 (4.2-57b) 和 (4.2-57c) 式拟合值．从图 4.2-22(a) 中看出，靶原子为族 IV 元素的 α 最佳拟合值比平均值 α' 偏低．为了知道这种偏差同 Z_2 的关系，可以计算每一种靶物质最佳拟合 α 的平均偏差，即

$$Q = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} \alpha(M_2/_{1i})/\alpha'(M_2/M_{1i}) \tag{4.2-58}$$

i 表示第 i 种离子．

方程 (4.2-57) 经验公式同实验结果比较示于图 4.2-23，其 α 和 E_{th} 由方程 (4.2-57b) 和 (4.2-57c) 计算出来．可看出，两者符合得很好．

这里，还要提一下方程 (4.2-57a) 中的修正因子 $Q(Z_2)$ 同 Z_2 的关系具有振荡行为．其原因是低能下核阻止截面同 Z_2 关系具有振荡特性．低能反冲原子和靶原子之间弹性碰撞的原子间势近似由波恩-迈耶势表示

$$V(r) = A\exp(-r/R) \tag{4.2-59}$$

其中 A 和 R 均呈现 Z_2 的振荡特性，从而使(4.2-27)式中 λ_0 和 a_{BM} 参数依赖于靶物质的原子序数．另一种可能是表面束缚能不等于升华能，因为升华能是热力学量而溅射过程是一个动力学现象，晶体中原子键在弹性碰撞下遭到破坏．

(5) 单晶溅射

最后，我们简要说明晶体方向性对溅射的影响．在晶体情况下存在聚焦碰撞，能量迁移是方向性的．由于(4.2-7)式的 $N(E_0, E)$ 和 (4.2-16) 式的 dt 均不再成立，故 (4.2-17) 式不能用了．晶

格结构对入射离子穿透的影响*)同总溅射产额发生直接关系。

如果一离子束以入射角θ（相对于表面的垂直方向的夹角）轰击单晶，而在表面垂直的方向探测溅射离子，如图 4.2-24 所示。样品可绕表面垂直方向转动并记录溅射离子同方位角ϕ之间的关系。图 4.2-25 给出氩离子以$\theta\sim 45°$轰击 Al (100) 表面得到溅射 Al^+ 强度同方位角ϕ之间的关系 Al^+ 离子发射强度随ϕ有激烈地变化：当束流(Ar^+)方向沿〈110〉轴(即$\phi=0$，$90°$，$180°\cdots$ 见图 4.2-25）照射时出现很深的极小值，

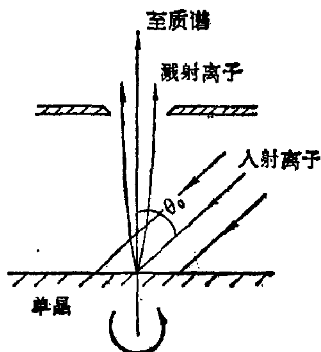


图 4.2-24 离子束轰击单晶靶的溅射示意图

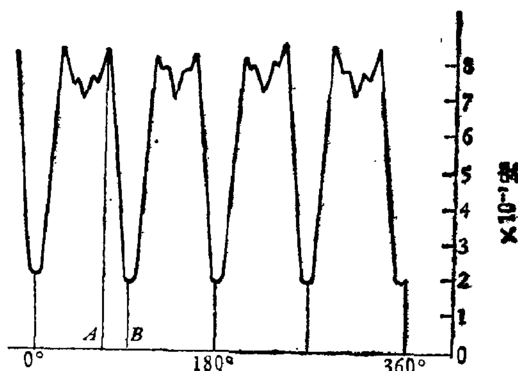


图4.2-25 氩离子在～45° 方向入射到 Al(100) 面溅射出 Al^+ 离子同方位角ϕ之间的关系

若采用硬球碰撞模型，可把每个原子看成小球，其半径小于原子间距（图 4.2-26）。当入射粒子轨迹与晶格原子相交时就发生

*) 这种影响在下一章论述。

撞击．如果束流沿〈110〉方向(如图 4.2-26 角 B 位置)，只有表面第一层原子会被入射离子撞击，其它原子均被屏蔽掉，这就是透明方向．这时溅射产额低，相应于溅射离子强度的极小值（参看图 4.2-25)．相反在角度 A 位置，第 3 层和第 4 层原子均可以被入射离子撞击，即所谓阻挡方向入射，溅射产额最高．

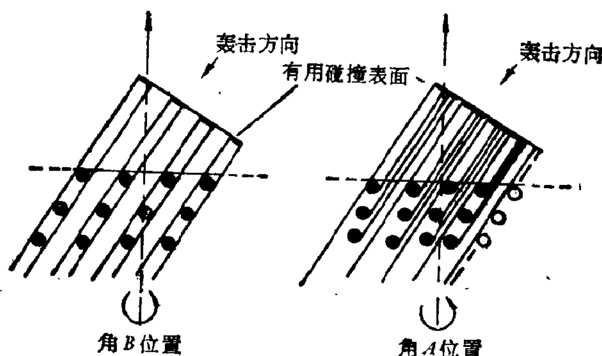


图 4.2-26　不同入射方向的有用碰撞表面，角 B 为透明方向，角 A 为阻挡方向

粗略地说，表面头三层原子碰撞数目正比于把原子"球"投影到垂直于入射束方向平面上所得到的表面，即所谓"有用碰撞表面"．这个表面愈大，溅射产额愈高．当转动样品时，入射束从相应于碰撞表面小的方向(透明方向)转到碰撞表面大的方向（即阻挡方向)，溅射离子产额随之由小变大．实验证明，当入射离子能量为几个千电子伏特时，溅射离子流强近似正比于头三、四层原子引起碰撞表面的变化．这表明单晶的溅射产额由于入射束流相对于晶相位置不同而改变三、四倍．

晶格取向对溅射产额的影响是一个相当复杂的问题．理论上研究涉及到入射粒子在晶格中的沟道效应，退道效应和聚焦效应等一系列软碰过程，以及线性碰撞序同表面的相互作用(参考文献[9]的第三章)．其外，由于入射粒子在轰击过程中对晶格表面晶相的侵蚀，使溅射产额发生变化．在仅考虑沟道效应的作用之后，

昂德待林顿(Onderdelinden)近似地把单晶的溅射产额 $Y(\theta_0, E_0, \psi)$ 同无结构的非晶物质溅射产额联系起来,得到

$$Y(\theta_0, E_0, \psi) = \eta \chi(\psi, E_0) \hat{Y}(\theta, E_0) \qquad (4.2\text{-}60)$$

式中 E_0 是入射粒子能量,θ_0 是入射束的极角,ψ 是束流偏离沟道方向的角度,$\hat{Y}(\theta_0, E_0)$ 则是没有结构介质在相同入射条件下的溅射产额[见(4.2-32)式]. χ 是相对退道额*). η 为效率,对于 1 至 5 千电子伏 Ar^+ 垂直入射到 Cu 和 Au 单晶实验给出 η 值从 1.1 到 1.4. 如果把多晶的溅射产额 Y_{poly} 当作 $\hat{Y}(E)$,那么 η 肯定大于 1,其原因是:

(i) 离子束随机部分总是同晶体最上层原子碰撞;

(ii) 入射到多晶靶的离子部分也有沟道效应;

(iii) 发射机理同取向的关联,如聚焦碰撞序.

图 4.2-27 给出 Ar^+ 离子入射到 Cu 靶上测得的溅射产额. η 的最好拟合值是 $\eta_{(100)} = \eta_{(111)} = 1.3$ 和 $\eta_{(110)} = 1.6$. 最大值位置的移动与理论(4.2-60)式预言符合很好.

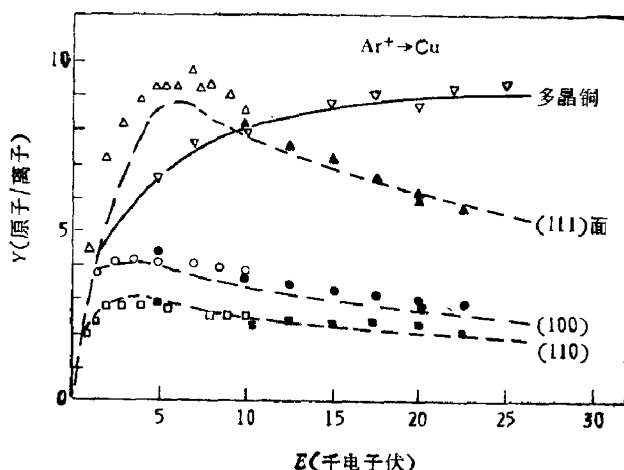


图 4.2-27 用沟道模型所理论预言的溅射产额和能量的关系(虚线)同实验结果比较

单晶靶溅射的角关联不仅同入射角 θ_0 而且同相对于低指数

*) 见 § 5.1 和 § 6.1,定义为沟道方向散射产额同随机方向的散射产额之比.

的方位角 ϕ 有关．例如，Ar^+ 入射到 Cu(100) 面并把 Cu 绕〈001〉轴转动，则溅射产额 $Y_{(100)}(\theta, \phi)$ 在如下几个入射方向观察到极小值：〈100〉轴 ($\theta = 0$)，〈211〉轴 ($\theta = 35°$)，而在 $\theta = 19°$ 时相当于〈411〉轴，示于图 4.2-28．在极小处的溅射产额随着入射能量的增加而减小；当入射能量高时溅射，角下沉的宽度较窄．

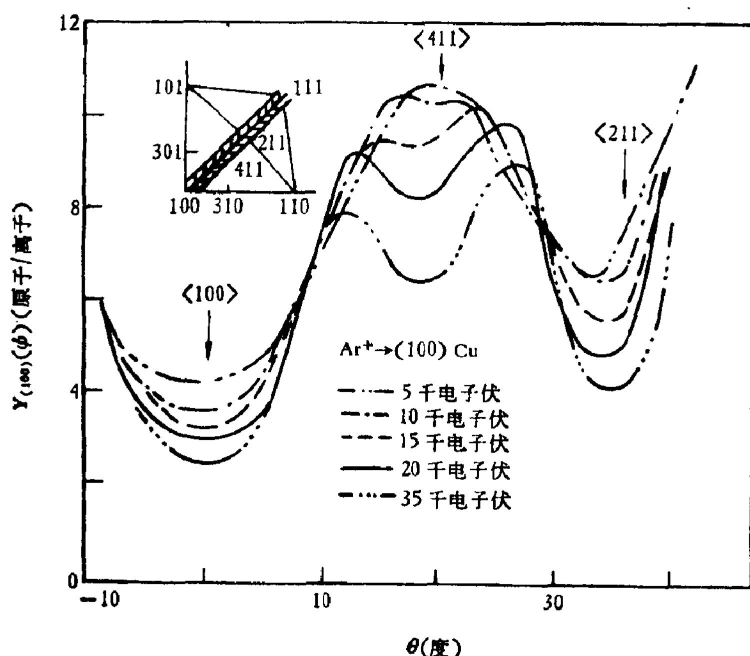


图 4.2-28　Ar^+ 离子入射到 Cu(100) 面并沿 $\langle 01\bar{1} \rangle$ 轴转动得到溅射产额 $Y_{(100)}(\theta, \phi)$ 的角关联[21]

六　透射溅射

当一个离子束打到薄膜上且薄膜的厚度很薄足以使离子穿过，这样在其两边均可观察到溅射，分别叫背溅射和透射溅射．严格地说，即使在没有入射粒子透射的情况下，只要有足够的能量传给薄膜另一边的原子并把它们打出薄膜表面就会发生溅射．

测量透射溅射的目的往往是要证实聚焦碰撞序的存在和范

围，以及原子碰撞级联空间分布的细节.

在厚度 t 的薄片中，假定反冲原子的位置和速度空间分布仍然遵从 (4.2-13) 式. 用类似于 (4.2-19) 式和 (4.2-21) 式的讨论可得到透射溅射产额

$$Y_{tr} = \Lambda F_{D,t}(E_0, \theta_0, t) \tag{4.2-61}$$

$F_{D,t}(E_0\theta_0, x)$ 是薄片厚度为 t 内淀积能量随深度 x 的分布.

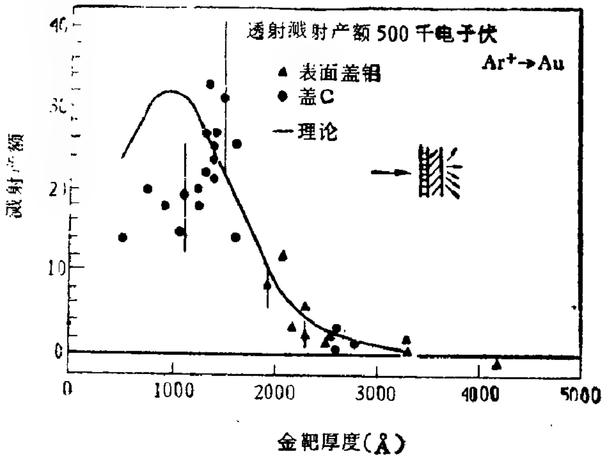


图 4.2-29　500 千电子伏 Ar^+ 离子轰击金箔的透射溅射. 对着束流的一面镀有碳或铝以减少背溅射. 实验结果同 (4.2-61) 式的理论预言相比较. 对于超过平均投影射程的靶厚，两者符合较好

当薄片的厚度 t 值足够大(也即，超过 F_D 的半宽度)时，函数 $F_{D,t}$ 接近于无限介质中的 F_D (图 4.2-29). 在 t 值比较小时，应考虑表面修正，类似 (4.2-49) 式. 至于 t 值在 F_D 半宽度之内，可用多重散射理论来确定 F_D. 当靶片很薄时，入射束通过靶衰减很少，初反冲速度决定着溅射产额.

§ 4.3　溅射的钉扎模式

线性级联理论在钉扎条件(图4.2-1c)下失效主要之点是(4.2-10) 式所呈现的 E_0^{-2} 规律遭到破坏. 当运动原子数目超过了级联

体积中有用原子数目时，不再遵从 E_0^{-2} 规律．此时在这个体积内大多数原子已经处于运动状态，能量耗散的方式与线性级联很不相同．于是，用普通方法估计线性级联的空间扩展已不适用于钉扎条件．目前级联碰撞中钉扎效应已有一些定性的判据，但是钉扎中能量传输机理和溅射产额的理论计算都存在着很大的不确定性．这里，把重离子对金属靶轰击产生的钉扎区域看成是一团致密气体的较为简单模型，运用气体动力学理论来讨论钉扎过程中能量输运和溅射产额．

先粗略估计一个级联中的能量密度．若一个级联体积 $\Omega(E_0)$，入射粒子能量为 E_0，那么每个原子的平均能量 $\bar{E}$ 由

$$\bar{E} \sim \frac{\nu(E_0)}{N\Omega(E_0)} \tag{4.3-1}$$

给出，$\nu(E_0)$ 为 (4.2-9) 式定义．体积 $\Omega(E_0)$ 很难精确确定，近似可取

$$\Omega(E_0) \sim \text{常数}\ [R(E_0)]^3 \propto \left(\frac{\gamma^{s-1}E_0^{2s}}{NC_s}\right)^3 \tag{4.3-2}$$

$R(E_0)$ 是离子的射程，而且，如果 E_0 很小 ($\varepsilon_L \ll 1$) 使 $\nu(E_0) \cong E_0$，

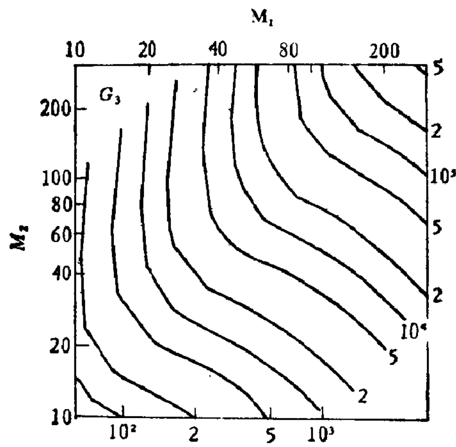


图 4.3-1　确定弹性碰撞钉扎中能量密度 $\bar{E}$ 的参数 G_3 的等值线图 $\bar{E} = (G_3N^2/E_0)\cdot$(千电子伏)[22]

则有

$$\bar{\bar{E}} \propto E_0^{1-\omega} \tag{4.3-3}$$

因此，$\bar{E}$ 随离子能量的增加而减小；若 E_0 是常数，则 $\bar{E}$ 因离子质量增加，穿透深度减小而增加. 图 4.3-1 和 4.3-2 给出一些定量的估计. 在重离子入射时，入射能量在千电子伏范围，每个原子平均能量是几个电子伏. 因此，当反冲能量下降到某一值 $E^* \gg \bar{E}$ 时，碰撞级联足够稀，可用线性级联理论(§4.2)来讨论，而当 $E < E^*$，则出现钉扎.

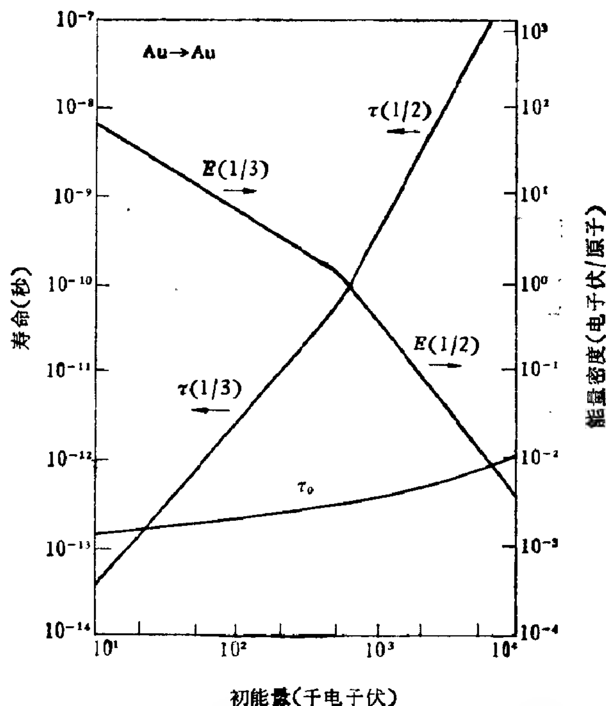


图 4.3-2　Au+ 离子入射到 Au 上的钉扎参数同入射离子能量 E 之间的关系. $\bar{E}$ 是钉扎中最大的有效能量密度，τ 为衰变时间常数，τ_0 是离子慢化时间[22]

在分子离子的轰击下较易形成钉扎. 图 4.3-3 是分子离子轰击时每个入射原子的溅射产额比单原子离子轰击时的溅射产额有很大的增强. 可以看出，随着离子质量的增加，这种增强效应也增

加，但随着离子能量的增加而减弱．这在定性上同(4.3-1)式—(4.3-3)式所预言的能量密度的特性相符合．

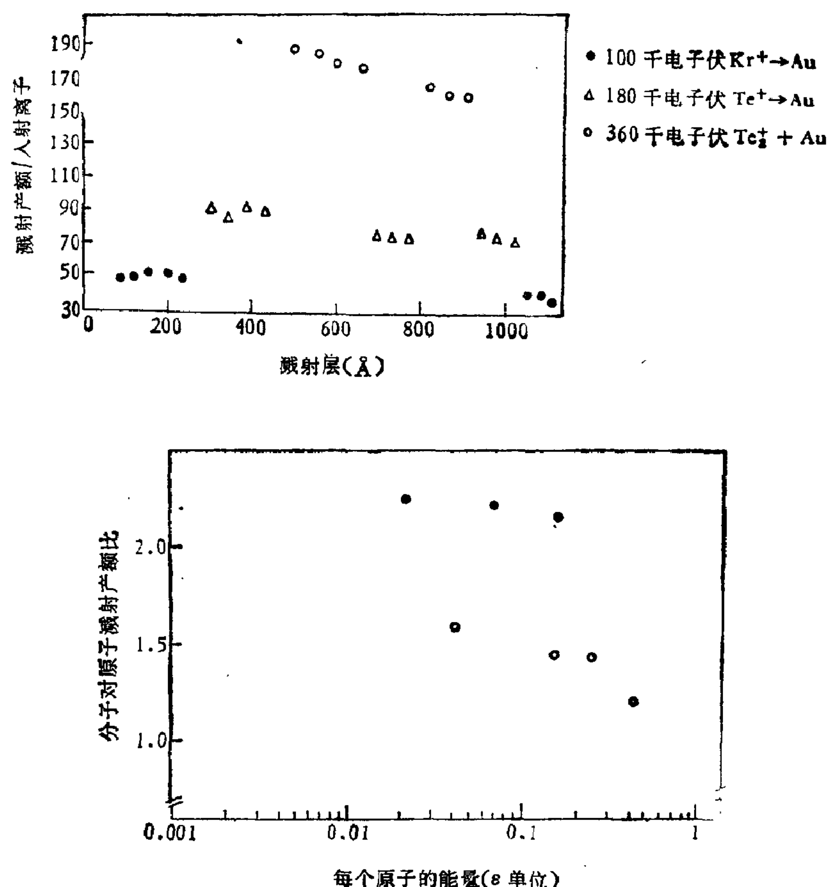


图 4.3-3 分别用原子和分子离子轰击金得到每个入射原子的溅射产额，(a)与溅射层的深度关系，(b)与约化能量 ε 的关系[参考文献[9]第55页)

在辐射损伤*) 的测量中钉扎效应有着重要的作用，而且同入射粒子的能量和质量有关．但是要定量研究会有不少困难．第一，单个级联的线性尺度会在(4.3-2)式的三次幂中出现，从而给出较

*) 见第八章．

大的误差；第二，不能确定 $R(E)$ 能否确定单级联的横向扩展；第三，由于形成子级联，局部的能量密度将更高；第四，从致密区域至表面时能量密度迅速下降。

更为重要的是，在钉扎中能量传输的基本特性不清楚。作为一级近似，把钉扎区域看成局部温度为 T 的理想气体，其中由 $3kT/2 \cong \bar{E}$ 给出，k 为波耳兹曼常数。由于原子密度高使这个系统的压力很大，大约是 $NkT = 2\nu(\bar{E})/3\Omega \sim 10^5$ 大气压（$\bar{E} \sim 1$ 电子伏）。因此，也可以认为在慢化过程中出现冲击波[23]。现在还不清楚，在钉扎中是能量"热"传输还是冲击波对溅射起主要作用。

把钉扎看成理想气体，可根据钉扎内靶原子麦克斯韦速度分布求出溅射产额[24]。在钉扎区域内，致密气体的特性可用与时间 t 和到离子轨迹的距离 r 有关的温度 $T(r, t)$ 来表示，而钉扎内部的能量传输则是由温度有关热扩散率决定的[22]，

$$\kappa = \frac{25}{48} \frac{1}{N\lambda_0 a_{BM}^2} \left(\frac{kT}{\pi M_2} \right)^{1/2} \qquad (4.3\text{-}4)$$

式中 λ_0 和 a_{BM} 由线性级联理论（4.2-27）式给出。对于金靶，$kT = 1$ 电子伏（也即是钉扎产生的温度范围），方程（4.3-4）得到 $\kappa = 3.0 \times 10^{-3}$ 厘米^2/秒$=3Å^2/10^{-13}$ 秒，这同温度在熔点之上蒸发时晶格的热扩散率数量级相同但数值略高一点。

假定围绕离子轨迹是一个初宽度为 $\langle r_0^2 \rangle^{\frac{1}{2}}$ 的柱形钉扎且同表面垂直相交。那么，热导方程

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot [\kappa(T) \nabla T] \qquad (4.3\text{-}5)$$

在柱形对称的几何条件下很容易解出。加上归一化条件

$$\frac{3}{2} Nk \int d^2 r\, T(r, t) = F_D' \qquad (4.3\text{-}6)$$

F_D' 为单位长度上淀积的能量，于是有

$$T(r, t) = t^{-2/3} [A - r^2/(12\kappa T^{-1/2} t^{2/3})]^2 \qquad (4.3\text{-}7)$$

这里，$A = (F_D'/6\pi\kappa T^{-1/2} Nk)^{1/3}$。此式说明碰撞剖面随时间发展不太快，$\langle r^2 \rangle \propto t^{2/3}$。图 4.3-4 示出方程（4.3-7）剖面与高斯分布之

间的差别.

令钉扎以很小的速率 $\Phi(T)$（单位时间单位面积的原子）蒸发原子，以使剖面基本上没有破坏，求解溅射产额是

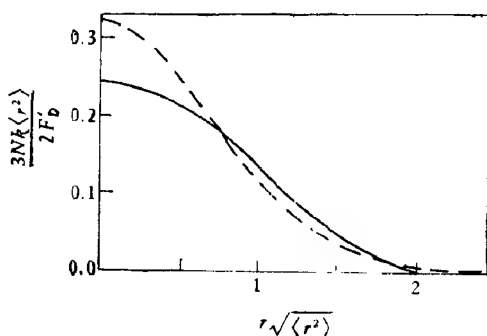


图 4.3-4 方程 (4.3-7) 的温度剖面同高斯剖面（虚线）相比较. 两者均按(4.3-6)式归一. 从方程(4.3-7)有 $\langle r^2\rangle = 3\kappa T^{-1/2}At^{2/3}$ 和 $T = (F'_D/2\pi Nk\langle\rho^2\rangle)(1 + \rho^2/4\langle\rho^2\rangle)^2$. 而高斯曲线有 $T = (2F'_D/2\pi Nk\langle r^2\rangle)\exp(-r^2/\langle r^2\rangle)$

$$Y = \int_{t_0}^{\infty} dt \int_0^{\infty} \pi dr^2 \Phi(T(r, t)) \qquad (4.3\text{-}8)$$

从 (4.3-7) 和 (4.3-8) 式找到

$$Y = \frac{\pi\langle r_0^2\rangle^2}{3\kappa(T_0)}\int_0^{T_0} \frac{dT}{(TT_0)^{1/2}}\Phi(T)\left[\left(\frac{T_0}{T}\right)^3 - 1\right] \qquad (4.3\text{-}9)$$

T_0 是 $t = t_0$ 时的芯温度，与 F'_D 的关系是

$$kT_0 = F'_D/2\pi N\langle\rho_0^2\rangle \qquad (4.3\text{-}10)$$

如果一个平表面的表面势 U_0 [见 (4.2-23) 式] 限定的理想气体具有蒸发率，

$$\Phi(T) = N(kT/2\pi M_2)^{1/2}\exp(-U_0/kT_0) \qquad (4.3\text{-}11)$$

显然它是遵从麦克斯韦-玻耳兹曼定律的.

将 (4.3-11) 式代入 (4.3-9) 式并积分，得到热溅射产额的表达式:

$$Y_{th} = 0.0360(\lambda_0 a_{BM}^2 F_D'^2/U_0^2)g(U_0/kT_0) \qquad (4.3\text{-}12)$$

式中

$$g(\xi) = (1 + \xi - \xi^2)\exp(-\xi) + \xi^3 \int_\xi^\infty dt' e^{-t'/t} \quad (4.3\text{-}12a)$$

同指数函数相近(图 4.3-5)。

上一节中描写线性级联 (4.2-21)、(4.2-26) 和 (4.2-27) 式所给出的溅射产额公式是

$$Y = 0.0484 F_D / N\lambda_0 a_{BM}^2 U_0 \quad (4.3\text{-}13)$$

其中 $F_D = F_D(x = 0)$ 是靶表面单位深度所淀积的能量。

方程 (4.2-12) 和 (4.2-13) 比较有如下特点：(i) Y 正比于淀积的能量 F_D，而 Y_{th} 的变化比 $F_D'^2$ 变化还快，其 $g(U_0/kT_0)$ 随 F_D' 的增加而单调增加。(ii) 热钉扎和线性级联溅射的区别随着淀积能量和束缚能比率的增加而增加。(iii) 在原子离子的轰击下，Y_{th} 具有极大值，其位置总是在核阻止能力极大值之下。(iv) 当用 n 个原子构成的分子轰击下，且离子速度不变时，Y_{th} 的增加比 n^2 要快，而 Y 正比于 n。说明热钉扎效应在大阻止本领或重离子轰击时易发生。

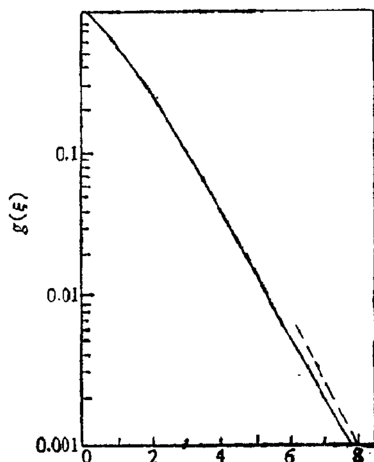


图 4.3-5 方程 (4.3-12a) 的函数 $g(\xi)$. 当 ξ 小时，$g(\xi) \sim 1 - 3\xi^2/2$；而当 ξ 大时，$g(\xi) \sim 3\exp(-\xi)$，为虚线表示

图 4.3-6 示出 Sb_n^+ 入射到银上的溅射产额. 其中选取了

$$F_D' = F_D(x = 0) = \alpha \cdot NS_n(E) \quad (4.3\text{-}14)$$

$F_D(x = 0)$ 即是 (4.2-28) 的值，且令 $\langle r_0^2 \rangle = 0$，表明溅射全部是热钉扎结果，线性级联的结果只是为了比较. 由图看出，实验测得的产额同理论预言定性上符合。

图 4.3-6 求得曲线所用的 $F_D' = F_D(x = 0)$ 是淀积能量的下限，实际的 F_D' 应大于 $F_D(x = 0)$。详细计算应考虑下列因素：

(i) 更符合实际的钉扎几何形状(这里采用的是圆柱形几何形状).
(ii) 溅射使能量损失掉， 结果钉扎冷却下来; (iii) 能量淀积的波动; (iv) 喷射坑 (crater) 的形成.

不过上述第 (ii) 点中我们已把温度方程 (4.3-7) 应用到无限大介质上,看来分析喷射口的形成就很重要了(这一点我们在辐射损伤问题中还要提到).

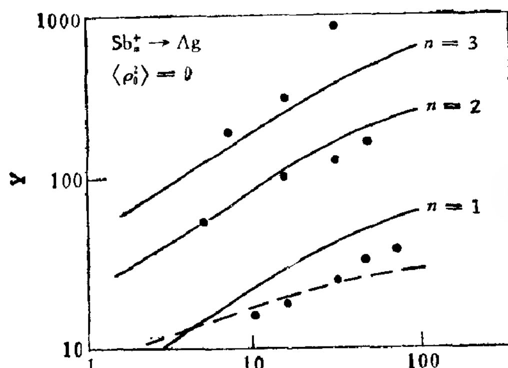


图 4.3-6 Sb_n^+离子入射到 Ag 的溅射产额, $n=1,2,3$. 实验结果取自文献 [25],实线是方程 (4.3-12) 的结果

这种弹性碰撞钉扎的描述只涉及钉扎区域内原子的局部高温,而把束缚能 U_0 这样的电子性质看成是作用于靶的宏观温度.

若考虑单位能量单位立体角的微分蒸发率，则 (4.3-11) 式变成

$$\Phi(T,E_1,\theta_1) = \frac{N}{(2M_2)^{1/2}(\pi kT)^{3/2}} E_1 \cdot \exp\left(-\frac{E_1+U_0}{kT}\right)\cos\theta_1 \qquad (4.3\text{-}15)$$

E_1 和 θ_1 分别是出射粒子的能量和出射角(图 4.2-9). 把 (4.3-15) 式代入 (4.3-8) 式即得到类似于 (4.2-32) 式的微分溅射产额

$$d^3Y_{th} = Y_{th}(E_1,\theta_1)dE_1 d^2\Omega_1 = 0.0688\lambda_0 a_{BM}^2 F_D' \cdot \frac{E_1 dE_1}{(E_1+U_0)^4} f\left(\frac{E_1+U_0}{kT_0}\right)\cos\theta_1 d^2\Omega_1 \qquad (4.3\text{-}16)$$

其中

$$f(\xi)=\left(1+\xi+\frac{1}{2}\xi^2\right)\exp(-\xi). \qquad (4.3\text{-}16a)$$

(4.3-16) 式的热钉扎溅射产额的分布与 (4.3-15) 式蒸发率的麦克斯韦分布在本质上是不同的：dY_{th} 依赖于 T_0，而从钉扎中蒸发时，样品的温度剖面 $T(r, t)$ 随时间和空间变化，可从最大值 T_0 变到靶的宏观温度(例如这里取零).

最后，值得一提的是，本节所采用的模型是把钉扎区域看成理想气体，能量传输的方法是热传输，即从气体动力论得到比热、热导率和蒸发率. 显然是把低气体密度推广到致密的热钉扎情况. 所以，只能在定性上给出溅射产额的趋势(图 4.3-6). 不过，由于实验观察到的溅射能谱大致遵守“麦克斯韦”分布，同冲击波传输概念相比[23]，目前较多地的理论探索仍用“热钉扎”的概念. 然而，无论在理论上还是实验上离问题解决还相差很远.

§4.4 多组分靶的溅射

研究多组分靶溅射特性的重要性在于：

(i) 一个单元素靶经长时间轰击把轰击元素注入样品形成了合金；

(ii) 溅射用于产生和分析薄膜时几乎都是处理多组分靶的问题；

(iii) 靶组分的变化会提供更多关于溅射过程的信息，从而加深理解材料性质同溅射产额的关系.

研究多组分靶溅射，主要系指合金溅射，其复杂性是靶中各组分的溅射不一定按照化学计量进行的. 因此，合金组分在轰击表面下一定深度范围发生变化. 当然，没有理由说合金一定要按其组分的化学计量进行溅射，也即是说，溅射原子的通量应该反应这些原子射出表层的组分.

从理论角度看，区别初级和次级效应是方便的. 初级效应包

含具有一定组分靶上单个溅射事件的物理过程，次级效应则包括长时间轰击使靶组分发生的变化。

一 初级效应

首先在均匀合金中观察初级溅射事件。安德逊和西格蒙德根据线性级联模式分析了两个无限介质中的能量分配[26]。直接把§4.2的讨论加以推广，从(4.2-20)式得到靶原子为$i(i=1,2)$的向外射出的电流$J_i dE_0 d^2\Omega_0$

$$J_i(E,\Omega)=\frac{G_i}{(G)_i}\cdot n_i F_D(E_0,\theta_0,0)\cdot\frac{\Gamma_{s_i}}{E|(dE/dx)_i|}\cdot\frac{|\cos\theta|}{4\pi}, \tag{4.4-1}$$

$F_D(E_0,\theta_0,0)$是合金表面每单位深度沉积的能量，$(dE/dx)_i$是一个原子i在元素i靶中的阻止能力，s_i为表征一个i类原子的截面指数。因子$G_i/(G)_i$是原子i在合金中通量函数G_i和原子i在元素i靶中通量函数$(G)_i$之比，这些通量函数由(4.2-15)式给出。它依赖于原子的浓度c_1和$c_2(c_1+c_2=1)$。但同散射指数s_1和s_2的关系很弱。图4.4-1表明，在两个组分的质量大体相等时可近似有

$$\frac{G_i}{(G)_i}\approx c_i\quad(M_1\approx M_2) \tag{4.4-2}$$

而对于组分质量相差很大的合金中，元素丰度最大的可超过(4.4-2)式的50%，元素丰度较小的却接近于(4.4-2)式给出的值。采用(4.2-21)式到(4.2-24)式的步骤，可得组分i的部分溅射产额

$$Y_i=c_i\Lambda_i' F_D(E_0,\theta_0,0),\quad i=1,2 \tag{4.4-3}$$

其中

$$\Lambda_i'=\Lambda_i\cdot\left(\frac{(U_0)_i}{U_{0i}}\right)^{1-2s_i}\cdot\frac{1}{c_i}\frac{G_i}{(G)_i} \tag{4.4-4}$$

这里，Λ_i是一种元素i靶的物质常数，由(4.2-24)式或(4.2-26)式给出，$(U_0)_i$是一种元素i靶中表面势垒，而U_{0i}是合金中一个i类原子的表面势。

当两个组分元素的质量大致相等时，(4.4-3) 式简化为

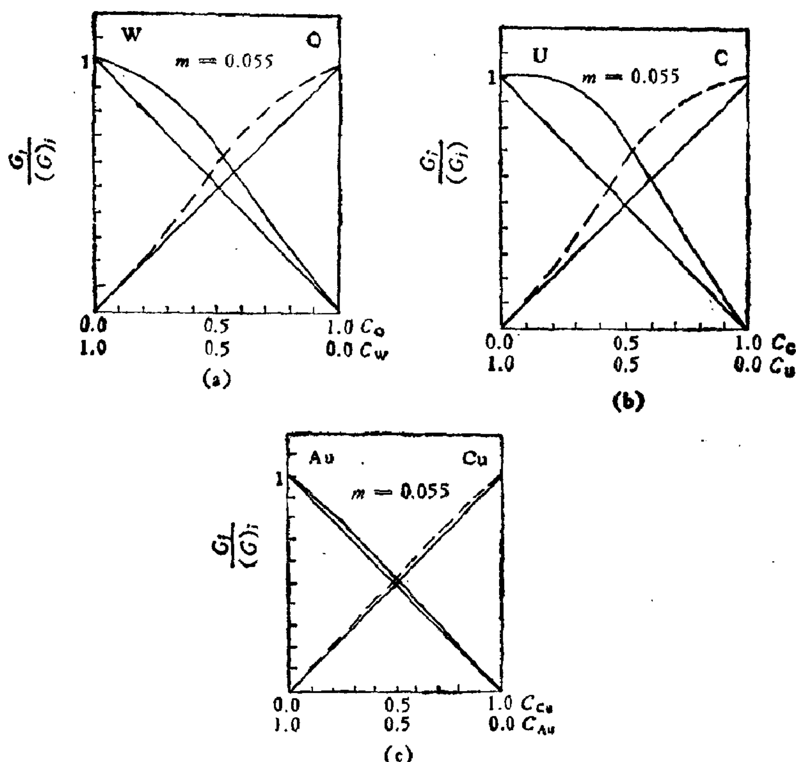


图 4.4-1 自合金 (4.4-4) 式的溅射粒子通量中的非化学计量因子 $G_i/(G)_i$，实曲线表示重的组分，虚曲线表示轻的组分. 直线是 $G_i/(G)_i = C_i$ (以比较). [26] (a) 氧化钨，(b) 碳化铀，(c) 铜-金合金

$$Y_i = c_i\left(\frac{(U_0)_i}{U_{0i}}\right)^{1-2s_i}(Y)_i \qquad (4.4\text{-}5)$$

$(Y)_i$ 是一个元素 i 靶的溅射产额. 这说明束缚得不紧的元素会优先溅射.

在组分质量很不相同时，情况就更复杂了. 由于总的能量沉积函数 F_D 同每个元素靶物质的能量淀积函数之间的关系相当复杂，故每个元素的溅射产额不大好调正. 根据第二章中阻止能力

的讨论，在最简单的情况下给出

$$F_D(E_0, \theta_0, 0) \cong c_1(F_D(E_0, \theta_0, 0))_1 + c_2(F_D(E_0, \theta_0, 0))_2 \tag{4.4-6}$$

此式的精度是很有限的，特别是当入射离子的质量在两个靶元素质量之间时，情况更严重，而这种情况在实用中经常遇到。

根据(4.2-17)和(4.2-24)式以及(4.4-3)和(4.4-4)式找到产额比 Y_1/Y_2 的简单关系

$$\frac{Y_1}{Y_2} = \frac{G_1(E)(dE/dx)_1}{G_2(E)(dE/dx)_2} \cdot \frac{U_{02}^{1-2s_2}}{U_{01}^{1-2s_1}} \tag{4.4-7}$$

当 $E_0 \ll E$. 方程(4.4-7)也可写成[26]

$$\frac{Y_1}{Y_2} = \frac{c_1}{c_2} \cdot \frac{s_{21}(U_{02})}{s_{12}(U_{01})} \tag{4.4-8}$$

式中 s_{ij} 是 i-原子碰撞到 j-原子的阻止截面. 而当 $s_1 = s_2$ 时，有

$$\frac{Y_1}{Y_2} = \frac{c_1}{c_2} \cdot \left(\frac{M_2}{M_1}\right)^{2s} \cdot \left(\frac{U_{02}}{U_{01}}\right)^{1-2s} \tag{4.4-9}$$

在 $M_1 = M_2$ 时，此式与(4.4-5)式一致。

方程(4.4-9)预言靶中较轻的元素优先溅射. 然而，由于假定 s 很小，只有 $0 \lesssim s \lesssim 0.2$，这种非化学计量效应不如表面势垒不同所引起的大. 而且，如果(4.4-2)式和(4.4-6)式成立，则从(4.4-1)式得到部分溅射产额的关系式

$$Y_j = c_j \left[c_1 \left(\frac{(U_0)_1}{U_{0j}}\right)^{1-2s_1} (Y)_1 + c_2 \left(\frac{(U_0)_2}{U_{0j}}\right)^{1-2s_2} (Y)_2 \right] \tag{4.4-10}$$

这式只存在靶中两组分质量差很小时才成立。

无疑，这些结果是从均匀介质推出的，也适用于非均匀介质. 只要在有关的深度范围采用平均组分就可把它们推广到非均匀介质. 由§4.2的讨论和能量淀积密度 $F_D(E_0, \theta_0, 0)$ 可知深度的数量级是 x，因此，(4.4-1)式中的 $G_j/(G)_j$，(4.4-9)式中的 c_1/c_2 和(4.4-10)式中的 c_j 都应用溅射深度 Δx 内的平均组分，其中

$$\Delta x \cong \frac{1-s}{1-2s} \frac{E^{2s}}{Nc_s} \tag{4.4-11}$$

是溅射原子在靶内出现的深度.

从(4.4-1)式看出,在线性级联方式内,溅射通量的组分与轰击离子束的类型、能量和入射角无关. 这说明此时从一个元素靶溅射原子角分布和能量分布均与束流参数无关.

通过类比,可以预见这些差别在单撞击(图 4.2-1a)和钉扎模式(图 4.2-1c)中也会出现. 前者已为实验证实并同退吸现象类似.

在钉扎方式中,根据 §4.3 给出的模型,似乎可以假定钉扎区域内能量均分. 于是,可得溅射产额比[9]

$$\frac{Y_1}{Y_2}=(c_1/c_2)(M_2/M_1)^{1/2}\exp(U_{02}-U_{01})/kT \qquad (4.4-12)$$

钉扎温度 T 同束流和靶均有关系. 同(4.4-9)式一样,元素轻且束缚弱的组分优先溅射,但同表面束缚能的关系与(4.4-9)式不同.

二 次级效应——表面组分的变化

择优溅射的结果,使接近靶表面的组分剖面发生变化. 因此,富集元素(也即开始时溅射产额低的元素)对溅射产额的贡献经过长时间轰击时逐渐增加,直至溅射通量的组分反映本体内的组分时为止. 厚度为 Δx_0 表层的组分是

$$\left(\frac{c_1}{c_2}\right)_{\Delta x_0}\cong\left(\frac{c_1}{c_2}\right)_{本体}\cdot\left(\frac{c_1Y_2}{c_2Y_1}\right) \qquad (4.4-13)$$

右边第二项因子由前面的理论(4.4-7)或(4.4-9)式给出. $\left(\frac{c_1}{c_2}\right)_{\Delta x}$ 实验上由俄歇电子谱学*)[27]和低能离子散射方法**)来确定. 不过前者取样深度比 Δx_0 略大;后者则探测很薄的表层,也即是其厚度比 Δx 薄. 问题的复杂性在于,离子轰击除了引起溅射外,还有许多本体过程产生,致使相当大的一部分能量传给了本体过程而不是给溅射原子. 虽然实验上还不知道荫蔽层内是否存在浓度梯度,

---

*) 见 § 4.7.

**) 见第三章 § 3.4.

但是实验确证离子感生组分的变化已深入到离子射程的数量级，即远大于荫蔽层 $\Delta x_0 \cong 5\,\text{Å}$.

影响穿透层组分的变化至少有下列四种本体过程:

(i) 分离;

(ii) 反冲注入;

(iii) 级联混杂;

(iv) 扩散.

当分离存在时，表面会形成分离相，从而阻止静态的发展. 反冲注入最初会使接近表面的重元素附集，而轻元素结集在较深的层；然而，在平衡时，在离子射程范围内轻元素附集. 不过，要达到这种平衡需要溅射掉不止一个离子射程的原子. 级联混杂和辐射增强扩散（见 §7.2）会把优度溅射和反冲注入所引起的浓度梯度抹掉.

现在讨论一下溅射对最简单的单相合金系统表面组分的影响. 如果合金是由原子质量相差很小的两种元素均匀地结合在一起. 那么，在线性级联方式中，由方程（4.4-5）和（4.4-13）得出表面浓度同束缚能的关系是

$$\left(\frac{c_1}{c_2}\right)_{\Delta x} = \frac{c_{01}}{c_{02}} = \frac{U_{01}}{U_{02}} \cdot \frac{c_1}{c_2} \tag{4.4-14}$$

这个结果是很粗糙的，特别是这里假定了合金中各种原子具有相同的能量分布. 但是，对某些合金（如 CuNi）还是得到了与实验符合的结果[28].

假定合金表面的组分开始时同本体一样，即 c_1 和 c_2，溅射后变成 c_{01} 和 c_{02}，且表面的原子密度是 N，而 $N_1(t)$ 和 $N_2(t)$ 分别是时刻 t 表面上原子 1 和原子 2 的数目，则表面浓度是

$$\begin{aligned} c_{01}(t) &= \frac{N_1(t)}{N} \\ c_{02}(t) &= \frac{N_2(t)}{N} \end{aligned} \tag{4.4-15}$$

在时间 Δt 内从表面消失的原子数 $\Delta N_1'$ 和 $\Delta N_2'$ 为

$$\Delta N_1' = Y_1(t) n_i \Delta t$$
$$\Delta N_2' = Y_2(t) n_i \Delta t \quad (4.4\text{-}16)$$

n_i 是入射粒子通量。$Y_1(t)$ 和 $Y_2(t)$ 由 (4.4-3) 式给出。

当轰击能量小于或等于一个千电子伏时，溅射粒子大多数是从最表层出来的。因此，组分的改变也主要是这一层。从最表层溅射掉 $(\Delta N_1' + \Delta N_2')$ 个原子后，则从第二层出现

$$\Delta N_1 = c_1(\Delta N_1' + \Delta N_2') \quad (4.4\text{-}17)$$

个原子 1。

这样，单位时间内原子 1 在表面的浓度变化是

$$\frac{dN_1(t)}{dt} = N\frac{dc_{01}(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\Delta N_1 - \Delta N_1'}{\Delta t} \quad (4.4\text{-}18)$$

也即是

$$\frac{dc_{01}(t)}{dt} = \frac{n_i}{N}[c_1 Y_2 - (c_1 Y_2 + c_2 Y_1) c_{01}] \quad (4.4\text{-}19)$$

它表明原子 1 的表面浓度随时间指数变化，其平均时间为

$$\tau = \frac{N}{n_i} \frac{1}{c_1 Y_2 + c_2 Y_1} \quad (4.4\text{-}20)$$

若 $c_1 \sim c_2 \sim 0.5$，$Y_1 \sim Y_2 \sim 3$，$N \sim 10^{15}$ 原子/厘米^2，在入射束流强度为 1 微安/厘米^{2}时，$\tau \sim 20$ 秒。

至于固体靶属于多相系统的溅射问题，就更为复杂了。例如，若多相系统是一种相以小颗粒形式存在于基体中的两相系统（催化剂中常有这种情形）。那么，除了上述各因素外，还要考虑颗粒的大小，分布状况、颗粒与基体、颗粒与颗粒之间的相互作用等因素对溅射的影响，理论上和实验上都还没有认真研究过。

三　固态化合物的溅射

(1) 碳化铪 (HfC) 溅射能谱

在线性级联条件下，化合物靶各个组分溅射产额的能量分布可近似由 (4.2-33) 式得到

$$\frac{dY_j}{dE_1} \sim \Phi_{L.c}(E_1) \sim \left(\frac{E_1}{E_1 + U_{0j}}\right)^{(3-2s_j)}, \quad j = 1, 2 \quad (4.4\text{-}21)$$

其假定条件和（4.4-14）式完全相同.

实验上采用 6 千电子伏 Xe^+ 离子轰击碳化铪（HfC），测得溅射 Hf 和 C 原子的能谱（图 4.4-2）[29]．由于这个化合物中两种元素的质量相差很大．预计 s_i 的差别也比较大．图 4.4-2 中的点是实验值，曲线是方程（4.4-21）式拟合结果，可见，两者符合很好．此时表面束缚能分别为：碳是 4.8 电子伏，铪是 6.7 电子伏．参数 s_C 和 s_{Hf} 近似相等，且接近于零．$s_C = s_{Hf}$ 是由于表层的组分发生了变化．按照安德逊和西格蒙德的说法，[26]只有在 s 大值时才会由于碰撞级联中能量均分引起的择优溅射（即非化学计量溅射），而现在 s_i 近于零，因此，在 HfC 溅射中，择优溅射不很明显．对于大多数所研究的化合物来说，质量比 M_2/M_1 均比 M_{Hf}/M_C 小，理论认为 s_i 的差别将更小．所以，我们可以说，从线性碰撞级联来看，化合物靶溅射原子的能量分布大致遵从

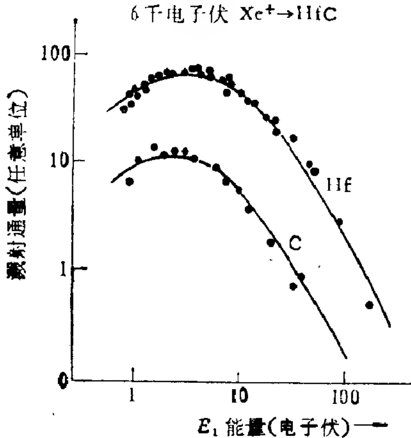


图 4.4-2　6千电子伏 Xe^+ 轰击 HfC 靶溅射出 Hf 和 C 原子的能量分布图．曲线为（4.4-21）式的理论值[29]

$$\frac{dY_j}{dE_1} \sim \left(\frac{E_1}{E_1 + U_{0j}}\right)^3 \sim \Phi_{L.c.,j}(E_1) \qquad (4.4\text{-}22)$$

(2) 合金的溅射

用 6 千电子伏 Ar^+ 离子束轰击 Cu_xZn_{1-x} 合金样品（$x=0.80$，0.24）来研究合金成分不同的束缚能对溅射的影响．由于铜和锌质量差很小，故在合金成分之间的能量分配过程是化学计量的，公式（4.4-22）可以同实验符合相当好．如果把 Zn 原子逐渐多加到合金中去，溅射粒子的能谱会系统地向低能方向移动．如果在靶中

增加铜的含量，溅射能谱会向相反的方向移动．这是因为合金组分改变引起 Cu 和 Zn 表面束缚能的变化． 而合金成分束缚能的不同又会在溅射中引起表面层组分的变化[见 (4.4-14) 式]．

合金组分的变化可定性地用化学键来理解．然而，许多情况下这些变化的幅度远大于束缚能的比值 [如 (4.4-14)]．原因是；

(i) 在离子轰击下合金成分的表面束缚能的精确值是不知道的，这些量只能用能谱测量来确定；

(ii) 许多情况的溅射过程不是线性级联控制的而是非线性效应；

(iii) 样品成分具有不同的迁移率会对表面组分有较大的影响。

例如，用 6 千电子伏 Xe^+ 离子轰击均匀的 $Ag_{0.6}Au_{0.4}$ 合金就有非线性效应的特性．图 4.4-3 给出从

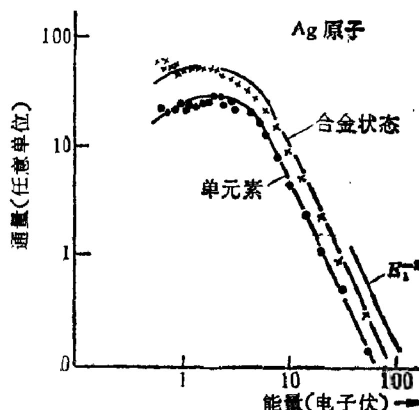


图 4.4-3 从单元素 Ag(·) 和合金靶 AgAu(×) 溅射 Ag 原子的能谱[30] 6千电子伏 Xe^+ 离子轰击的、存在相同的渐近特性记为 $\sim E_1^{-2}$

AgAu 合金溅射出 Ag 原子能谱，并同单元素 Ag 靶的溅射相比较，表明两者有相同的渐近特性，即线性级联溅射，具有 $\sim E_1^{-2}$ 的关系 [见(4.4-21) 式]．但是，在低能端的实验值(不管是单元素靶还是合金靶)同线性级联理论曲线有明显的偏离．因此，可以假定能谱的高能部分是由线性碰撞级联引起的，然后从实验谱中分出钉扎的贡献，如图 4.4-4 所示．当 6 千电子伏 Xe^+ 离子轰击 AgAu 合金靶溅射 Ag 原子时，可明显地分出线性级联和钉扎贡献两部分：前者满足 (4.4-21) 式，后者则由 (4.3-15) 和 (4.3-16) 式给出．

最近，卡特 (Carter)[31] 和另外一些人[32]提出，当速度比较慢的重离子轰击重原子靶会产生集体向外运动，其速度远大于声速．描述这种现象涉及到质量和能量的传输，因此是原子范围内的冲击

过程。固体中冲击波和其同表面相互作用的理论处理确会导致表面原子蒸发。不过，冲击波只是发生在入射粒子进入固体的有限能量范围。在离子注入的能量范围，冲击波起作用之前碰撞级联是以线性方式发展。由于冲击波是同速度远大于声音时发生原子迁移密切相联系，因此，由冲击波传播所溅射粒子的动能一定很高。然而，目前所观察到的大多数溅射粒子能谱中(如图 4.4-3 和图 4.4-4)都是在低能区出现非线性效应，它是同热能量传输相对应的。这也是冲击波理论还不能为人们接受的一个原因。

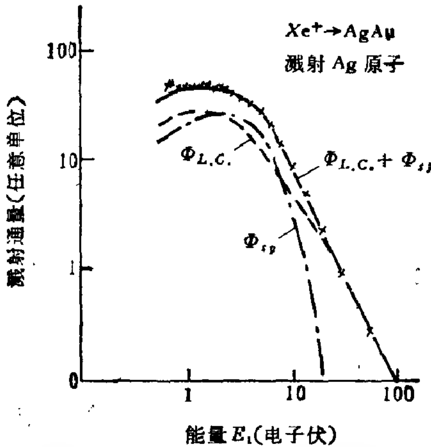


图 4.4-4 6 千电子伏 Xe^+ 离子束轰击 AgAu 合金靶溅射 Ag 原子能谱[30]. 实验分布可分解成线性级联 $\Phi_{L.C.}$ 满足 (4.4-21)式和钉扎的贡献 Φ_{sp}，由 (4.3-15) 和 (4.3-16) 式表示

(3) 离子化合物溅射 (ionic compounds)

在研究溅射机理时，采用卤化物靶很有用，因为不同过程溅射的粒子具有特征能谱，而且分得很开，也即是说，卤化物实验能谱很容易分成碰撞级联、钉扎和热蒸发等几个部分。前两部分在图 4.4-4 中已有表示。热蒸发效应主要是由于入射离子在离子晶体中慢化过程，除了受弹性碰撞外，还同电子发生非弹性碰撞而损失能量的结果。(4.2-9) 式重写如下:

$$E_0 = \nu(E_0) + \eta(E_0) \tag{4.4-23}$$

两种碰撞过程的能区是不同的，高能离子主要是非弹性碰撞。6 千电子伏 Xe 离子在 LiI 中慢化，ν/η 等于 15.7，而 6 千电子伏 Ne 离子就降到 2.7，如果入射粒子是 Ar^+ 或 Kr^+ 则 ν/η 就更小，非弹性碰撞的成分就很大了。因此，入射离子的能量有相当一部分是

用于卤素子晶格激发或电离。这个能量通过普利-黑尔施（Pooley-Hersh）过程转换成动量，所产生的缺陷是 F- 中心（一个电子占据卤素空穴）和 H- 中心（一个卤素分子离子 Xe^- 占据一个晶格位置）。H- 中心（实际是间隙性卤原子）的定向运动很快为离子轰击造成严重损伤的晶格所散焦。然而，H- 中心由热扩散到达表面，造成这种间隙性卤素原子热蒸发，其机理类似于电子溅射过程。从等温表面蒸发粒子的能量分布由

$$\frac{dY_{i.s.}}{dE_1} \sim \Phi_{i.s.}(E_1) \sim E_1 \exp(-E_1/kT_s) \qquad (4.4\text{-}24)$$

近似给出，式中 T_s 是表面温度。实验上，在卤化物中注入惰性气体原子得到蒸发粒子的能谱。图 4.4-5 示出 6 千电子伏 Kr^+ 离子轰击 LiI 溅射出 I 原子的分布，可以看出，在 0.1 电子伏以下的实验点不符合碰撞级联 $\Phi_{L.c.}$ 而同（4.4-24）式符合很好。很明显，这是由于离子束引起 LiI 靶分解，然后，碘因高蒸气压而汽化的结果。这就是所谓"电子溅射模型"。不挥发的 Li 停留在表面上，并且只能为碰撞级联的机制溅射出表面。如果卤化物中的金属也是一

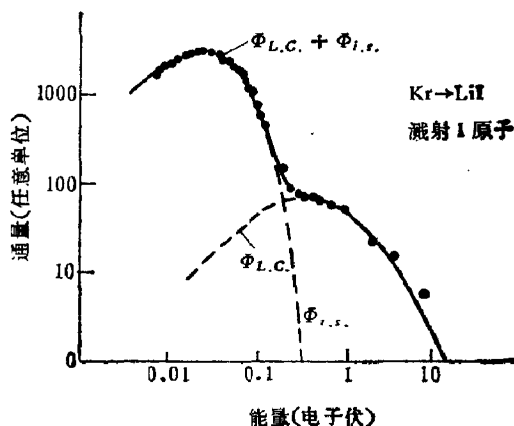


图 4.4-5　6.0 千电子伏 Kr^+ 轰击 LiI 溅射 I 原子的分布。实线为理论值可分成两种分布 $\Phi_{L.c}$ 和 $\Phi_{i.s.}$（虚线）：$\Phi_{L.c.}$ 是线性级联，$\Phi_{i.s.}$ 是热蒸发[30]

种易挥发性的，那么，在离子轰击下，除了碰撞级联引起的溅射外，还会有过量的金属原子从靶表面汽化出，使得在金属原子的能谱中也出现"热"贡献的部分．无疑，靶成分之间的汽化压不同，在离子轰击时会使表面的化学计量变化较大，不太挥发的元素会富集起来．

对于含有比较挥发性金属的卤化物溅射，三种溅射均可以同时存在．即在线性碰撞级联和钉扎衰减之后，热粒子从表面汽化出去．图 4.4-6 给出这类实验结果的例子，6 千电子伏 Ar^+ 离子束轰击 RbI 溅射出 I 原子的能量分布．

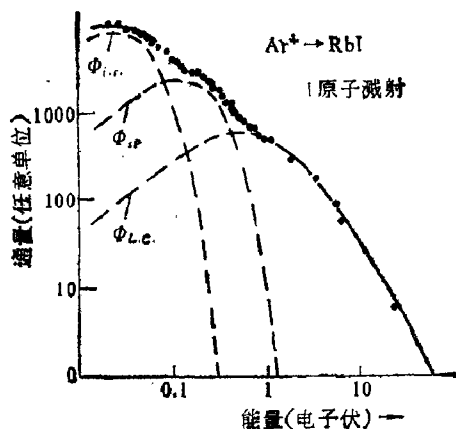


图 4.4-6 6 千电子伏 Ar^+ 离子入射到 RbI 靶上溅射出碘原子能谱，实验能谱(点加实线)是由三部分 $\Phi_{i.s.}+\Phi_{sp}+\Phi_{L.c.}$ 组成的[30]

§ 4.5 溅射粒子的电荷状态

当固体表面受到运动离子(或中性粒子)轰击时，溅射出的粒子具有各种电荷状态．从前面几节的讨论中可以看到，对于粒子发射过程虽然还不完全清楚，但已有一些理论(如线性碰撞级联)[1]在某些情况下同实验符合较好．比较而言，对于溅射粒子电荷状态的过程，知道就更少了．这是因为发射粒子的电离过程与电子

环境的动力学关系很密切．而电子环境不仅依赖于固态基体和其组分粒子的电子结构，而且与粒子发射过程的机理本身有关．因此，不同基体溅射出不同粒子的离子产额可以相差几个数量级．离子产额的不确定性则又直接影响二次离子质谱（SIMS）、快原子轰击谱学（FABS）等作为探测固态表面元素浓度分析工具的精度．另一方面，这些方法以及后面俄歇退激过程，对于固态表面的电子结构和几何特性极为灵敏，故在表面物理和固体物理中有广泛的应用．所以，近年来，无论在理论上还是实验上研究溅射粒子的激发（电离）和退激（中性化）过程是很感兴趣的．本节重点讨论其电离过程，并将理论预言和实验结果进行比较．

一 基本假定

这里讨论的范围仅限于线性级联或撞击反应的过程[图 4.2-1(a),(b)]．基本特点是碰撞级联不包含很多粒子的激烈碰撞和深能级空穴产生而引起的发射过程．涉及少数原子碰撞过程所发射的原子大多是低能的，对利用溅射作为分析方法是最重要的．

我们基本假定，由低能碰撞级联过程产生的粒子是按下列经验关系电离的：

$$P^+(M) = \exp\{[\varepsilon_F^+(M) - \varepsilon_M]/kT_M^+\} \qquad (4.5\text{-}1)$$

$$P^-(M) = \exp\{[A_M - \varepsilon_F^-(M)]/kT_M^-\} \qquad (4.5\text{-}2)$$

$P^+(M)$ 和 $P^-(M)$ 分别是粒子M正电离和负电离几率．P定义为发射粒子中带电通量和不带电通量之比．ε_F 和 T_M 是相应的有效"费米能量"和"有效温度"．ε_M 和 A_M 分别是电离势和电子亲合势．(4.5-1) 和 (4.5-2) 关系式虽然可以从固态表面热电离过程得到，但 ε_F 和 $\hat{T}$ 并不一定具有热力学含义．从实验观察发现，相同的基体而 T_M^+ 和 T_M^- 的值差别很大．

实验上考察 (4.5-1) 和 (4.5-2) 式的可靠性，往往是有一个参数随时间变化，测量 P^+ 同这种变化的关系．例如，ε_M 的变化可用不同杂质加入相同基体表面，然后测量 P^+．另外一种办法是测量一种溅射原子的电离系数并改变表面条件．这些改变会影响

表面的电子结构，这样，也就影响到发射粒子的电子环境。同时，改变着固态表面的静电势。假定宏观功函数 $e\Phi$ 的变化 $\Delta(e\Phi)$ 确定着表面静电势的变化，并且 $\Delta(e\Phi)$ 以不同的方向影响着正的和负离子强度。而电子参数的变化却以同方向改变着正负离子的强度。

实验证明 P^+ 和 P^- 依赖于发射粒子的动能 E_1，不同的系统 $P(E_1)$ 不同，但大多数正离子的数据遵从下面关系：

$$P^+(E_1)\propto E_1^n,\ 1.5\geqslant n\geqslant 0 \tag{4.5-3}$$

而 P^- 同动能的关系还没有系统地研究过，可能与 (4.5-3) 式差别不太大。电离系数能量关系的确定将有助于检验电离理论。

二　电离理论

(4.5-1) 式和 (4.5-2) 式最简单的解释是在固体表面产生局部热平衡(LTE)。然而，LTE 的物理基础值得怀疑。许多实验证明，溅射粒子的电离不能用简单热平衡过程来解释。如上所述，在热平衡下正离子和负离子的有效温度应该相同.但实验上，大多数溅射原子的 T^+ 是 T^- 的两倍。而且，功函数的变化必然影响到自相同表面溅射正离子的强度，其改变程度为 $\exp(\Delta e\Phi/kT^+)$，同样，所有负离子强度也应改变 $\exp(-\Delta e\Phi/kT^-)$ 倍。实验上，不同电子半径的离子受功函数变化的影响非常不同。一般来说，离子半径较小(也即，具有大的电离能或大的电子亲合力)受 $\Delta e\Phi$ 的影响也较小，而离子半径大的受 $\Delta e\Phi$ 的影响也较大。

电离几率同溅射粒子和基片电子性质存在着显著的关联促进电离过程量子力学模型的发展。假定物理模型如图 4.5-1 所示，即基体是一个半无限大的固态材料，具有平移对称性。那么数学上可用与时间有关的哈密顿[32]

$$H=\varepsilon_a(t)C_a^+C_a+\sum_i\varepsilon_i(t)C_i^+C_i+\Sigma[V_{ai}(t)C_a^+C_i+h_0c_0] \tag{4.5-4}$$

来描写，式中脚标 a 是指溅射原子，并且假设溅射原子只有一个能

量为 ε_a 的价电子轨道 $|a\rangle$. 脚标 i 系指能量为 ε_i 的基体轨道 $|i\rangle$. V_{ai} 是轨道 $|a\rangle$ 和 $|i\rangle$ 之间的转移积分. C 和 C^+ 为量子力学中常用的消灭和产生算符.

当基体中原子不运动("冻结"基体)时, ε_i 与时间无关, 溅射原子电离只有通过 $|a\rangle$ 能级非绝热跃迁到费米能级之上的 $|i\rangle$ 能级才能发生. 这种非绝热跃迁是由与时间有关的转移积分 $V_{ai}(t)$ 诱发的. 除了这种电子转移外, $V_{ai}=V$ 同时还会引起离子中性化过程. 如果 $V(x)$ 随空间的变化是 $V\exp(-\lambda x)$, 其中 x 是原子离开表面的距离, 那么, V 随时间变化的关系式为

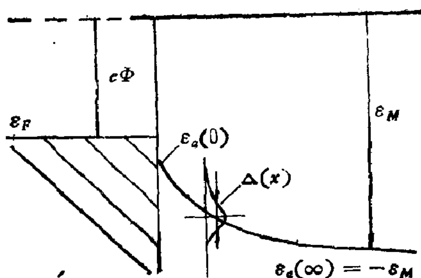


图 4.5-1 固态表面电离过程示意图: $e\Phi$ = 功函数, ε_F = 费米能量, $\varepsilon_M = -\varepsilon_a(\infty)$ 为溅射原子的电离能. ε_a = 溅射原子的价电子能级. $\Delta(x)$ = 价电子能级宽度

$$
\begin{aligned}
V(t) &= V\exp(-\lambda vt) \quad t \geqslant 0 \\
V(t) &= V \quad t < 0
\end{aligned} \tag{4.5-5}
$$

式中 v 是溅射粒子的速度.

图 4.5-1 中能级 $|a\rangle$ 的有效能量宽度 $\Delta(x)$ 定义为

$$
\Delta(x) = \frac{\pi}{\hbar} V^2(x)\rho \tag{4.5-6}
$$

ρ 为 $|i\rangle$ 态密度. 对于只有两个原子轨道 $|a\rangle$ 和 $|i\rangle$ (一个溅射原子有一个轨道 $|a\rangle$ 和一个基体原子有一个轨道 $|i\rangle$) 的两轨道两原子系统, 若 ε_a 和 ε_i 与时间无关, $\varepsilon_a < \varepsilon_i$, 且不考虑自旋简并, 在 $t=-\infty$ 时, 系统的轨道 $|a\rangle$ 为一个电子所占据, 而 $|i\rangle$ 是空着. 那么, 倘使电离几率 P^+ 远小于 1, 则可直接由

$$
P^+ = 1 - \langle C_a^+(+\infty) C_a(+\infty) \rangle \tag{4.5-7}
$$

算出[39]. 于是

$$P^{+}=\left|\frac{1}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty}V(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_i-\varepsilon_a)t\right]dt\right|^2 \quad (4.5\text{-}8)$$

式中 $V(t)$ 则由 (4.5-5) 式给出.

如果基体在费米能量上下包含许多能级, 可把 (4.5-8) 式推广到费米能量上面的连续区,

$$P^{+}=\frac{1}{\hbar^2}\int_{\varepsilon_F}^{\infty}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}V(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_i-\varepsilon_a)t\right)dt\right|^2\rho(\varepsilon_i)d\varepsilon_i \quad (4.5\text{-}9)$$

$\rho(\varepsilon_i)$ 是空穴态密度. $V(t)$ 一般依赖于能量 ε_i, 但我们不考虑它. 然而, 由于存在着费米能量下面占据态电子的隧道效应和俄歇退激, (4.5-9) 式还必须包括电离中性化过程. 因此, 一个从时刻 t 开始的激发(也即是电子从溅射原子转移到 ε_F 上面的空穴态) 生存到 $t=\infty$ 的几率是

$$P(t)=\exp\left[-\int_t^{\infty}W(t')dt'\right] \quad (4.5\text{-}10)$$

$W(t')$ 是共振隧道或俄歇过程引起的中性化几率. 于是, (4.5-9) 式中的相因子相应地减弱了, 也即是说, 应乘以 $P(t)$. 结果是[34]

$$P^{+}=\frac{1}{\hbar^2}\int_{\varepsilon_F}^{\infty}\left|\int_{-\infty}^{+\infty}V(t)\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_i-\varepsilon_a)t-\int_t^{\infty}W(t')dt'\right]dt\right|^2\rho(\varepsilon_i)d\varepsilon_i \quad (4.5\text{-}11)$$

为了求得积分 (4.5-11) 的分析解, 我们假定中性化只是由共振隧道产生的, 和描写隧道的转移积分 $V(t)$ 与 (4.5-9) 式相同. 而且, 不考虑电子带的精细结构, 即令 $\rho(\varepsilon_i)=\rho$, 由(4.5-6)式给出. 于是, 中性化几率为

$$W(t)=\frac{2\pi}{\hbar}V^2(t)\rho=\frac{2}{\hbar}\Delta(t) \quad (4.5\text{-}12)$$

当溅射原子在 $t=0$ 时处在表面或很接近表面, 一个电子宽度 $\Delta(0)$ 为几个电子伏特, 远大于 $2\hbar\lambda v$ ($2\hbar\lambda v\sim0.1\text{eV}$). $(\varepsilon_F-\varepsilon_a)$ 也比 $2\hbar\lambda v$ 大许多. 这样, (4.5-11) 积分才有指数形式的分析解

$$P^+ = \frac{2}{\pi}\exp\left[-\frac{\pi(\varepsilon_F - \varepsilon_a)}{2\lambda\hbar v}\right] = \frac{2}{\pi}\exp\left[-\frac{\pi(\varepsilon_m - e\Phi)}{2\lambda\hbar v}\right] \tag{4.5-13}$$

式中 ε_m 和$e\Phi$ 和 (4.5-1) 式的相同.

将 (4.5-13) 和 (4.5-1) 两式比较，得到一个"有效温度"的定义

$$T_{\rm eff} = 2\lambda\hbar v/k\pi \tag{4.5-14}$$

k 为玻耳兹曼常数. 把 (4.5-13) 和 (4.5-14) 式应用到实际的物理系统中存在一些困难. 例如，当 $\lambda = 2\,\text{Å}^{-1}$，质量为 20 原子质量单位 (amu) 的粒子具有的速度相当于功能 $E_1 = 10$ 电子伏，计算的有效温度值 $T_{\rm eff} = 700$K. 这比典型的"有效温度"值 3000K 和 10000K 之间低很多. 更为严重的是，通过入射与出射粒子速度的关联，式 (4.5-13) 可以改写成

$$P^+ = \exp[-A/(E_1)^{1/2}] \tag{4.5-15}$$

式中 A 与 E_1 无关，并且当 E_1 一定时可以调节以适合 P^+ 的绝对值. 为了考察理论和实验符合程度，对 GaAs 溅射出 Ga^+ 和 As^+ 进行拟合. 镓和砷质量差不多，毫无疑问，溅射出中性粒子的能量分布十分相似. 实验证明 Ga^+ 的强度比 As^+ 的强度大 1000 倍(其原因主要是镓的电离势小)，但两者能量分布几乎相同(如图 4.5-2). 适当调节 (4.5-15) 式中 A 值，得到 As^+ 能量的理论分布，可

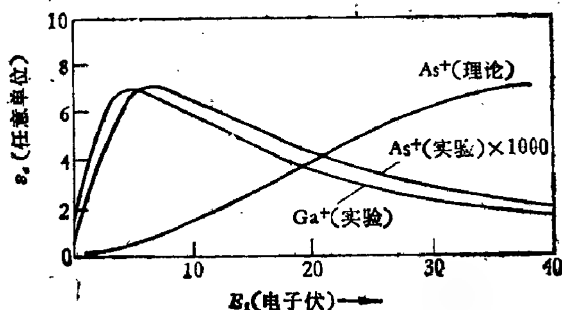


图 4.5-2 自 GaAs 溅射粒子的能量分布，As^+ (理论)是从方程 (4.5-15)计算出来的[35]

以看出理论预言和实验结果差别是很明显的，其原因是基体中原子运动引起激发对 P^+ 作贡献。所以，这种理论应包括精细描述碰撞级联中激发电子转移到出射原子或原子簇的过程，本质上是相当复杂的。当然，如果采用紧束缚模型的理论框架，可以把复杂过程用少数几个参数来表征。由于晶格周期性在轰击时遭到破坏过程中使用电子带的概念是有问题的，故不得不采用原子位置的表象。于是，(4.5-4) 式的哈密顿形式变为

$$H = \varepsilon_a(t)C_a^+C_a + \sum_i \varepsilon_i(t)C_i^+C_i + \sum_{i\neq j} V_{ij}C_i^+C_j + \sum_j [V_{ja}(t)C_j^+C_a + h.c.] \qquad (4.5\text{-}16)$$

式中脚标 i 和 j 系指对角能量 ε_i 和 ε_j 基体原子的电子轨道 $|i\rangle$ 和 $|j\rangle$。其它参数的含义与 (4.5-4) 式表达相同。一般情况求解 (4.5-16) 式是相当复杂的，只有用计算机才能找到 P^+。为了使计算机时间能接受，兹罗拜克 (Stroubek)[36] 等人选取了只含七个原子的简单系统，如图 4.5-3。其中五个基体原子，一个入射粒子和一个出射粒子。并且，假定所有的粒子具有相同的质量，即等于 20 个质子质量。在图 4.5-3 中黑球表示入射粒子，斜线球表示溅射粒子。轰击粒子的动能为 400 电子伏，另外 5 个原子构成固态基体。原子经典运动的力由两部分组成：弱的向心引力和斥力。中心力由势函数的空间微商给出的。这个势函数等于 $3.7r^2$（电子伏 Å）($r \leqslant 4$ Å)，而当 $r >$ 4 Å时为一常数，r 是到该 5 原子系统中心的距离。斥力是由势 $1.45\times 10^5 \exp(-3.5r_{ij})$（电子伏 Å）的空

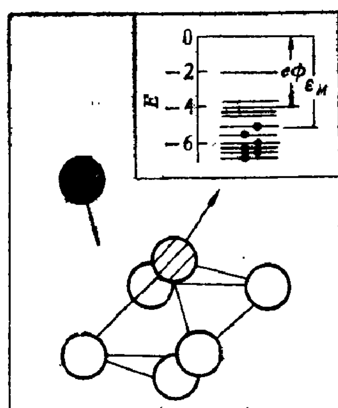


图 4.5-3 计算模拟所用的原子模型。7 个原子系统包括，5 个基体原子（白球）一个溅射原子（斜线球）和一个入射粒子（黑球）。原子之间的距离以埃为单位。原子的电子结构示于右上方的能级图。ε_M 是溅射粒子的电离能，$e\Phi$ 没有电子态的最高密度[36]

间微商给出的，其 r_{ij} 是原子 i 和 j 之间的距离。要进行模拟，至少应假定基体是半无限的，而且靠近 5 个基体原子的其它原子(图未画出)固定在自己的位置上，其作用仅是提供斥力不致产生向前溅射。

基体原子具有两个电子能级，间距为 2 电子伏，较深的一个是在零能级(真空)以下 6 电子伏，轰击原子没有能级(为惰性气体的离子)，溅射原子只有一个能级，其能量为 ε_a(自真空能级算起)。ε_a 的绝对值等于电离能 ε_M，但不同的溅射粒子有不同的电离能。若两个原子能级之间的电子转移积分依赖于原子间距 r_{ij}，其形式为 $V_{ij}^0\exp[\lambda_{ij}(r_{ij}^0 - r_{ij})]$，$r_{ij}^0$ 等于 3.36Å 和 V_{ij}^0 等于 0.29 电子伏。在轰击粒子碰撞前系统的能级如图 4.5-3 右上方图示，为 6 个电子所占据(并考虑自旋简并)。

合理地选取入射粒子的碰撞点，要离开溅射粒子足够远已避免简单的两体碰撞，溅射粒子的动能 E_1 几乎可以从零变到 100 电子伏。对所有原子对保持相同的 $V_{ij}^0 = 0.29$ 电子伏和 $\lambda = 1.5$ Å^{-1}，改变动能 E_1 来计算不同 E_1 时 P^+ 值。图 4.5-4 示出不同电离能 $\varepsilon_M = -\varepsilon_a$ 时 P^+ 同 E' 的关系。图 4.5-5 则给出动能 $E_1=40$ 电子伏时 P^+ 与电离能量 ε_M 的关系，可以看出，在半对数坐标上，P^+ 同 ε_M 关系近似为一条直线，符合 $\exp[-(\varepsilon_M - e\Phi)/kT]$ (如 $T=1800$K 和 $e\Phi = 4.1$ 电子伏]的指数关联。

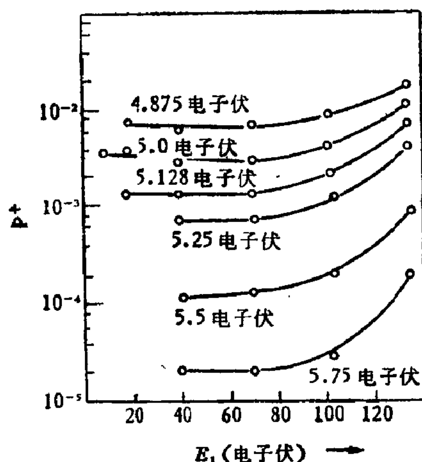


图 4.5-4 计算的电离产额 P^+ 和溅射粒子功能 E_1 的关系。计算是在 $\lambda_a = \lambda_s = 1.5$Å^{-1}[36]

改变参数 λ 考察 P^+ 的变化，定义 λ_a 代表基体和溅射原子之

间的参数 λ，λ_s 代表基体原子间的参数 λ. 除了已经表明的 $\lambda_a = \lambda_s = 1.5$ 外（图 4.5-5 中的点），还有：(i) $\lambda_a = 1.5$，$\lambda_s = 3$；(ii) $\lambda_a = 3$，$\lambda_s = 1.5$ 和 (3) $\lambda_a = 3$，$\lambda_s = 3$ 等均示于图 4.5-5 中. 这些电离过程比 $\lambda_a = \lambda_s = 1.5$ 的快. 在 $V_{ij}^0 = 0.29$ 电子伏时，它们也近乎一直线，并可估计出有效温度分别为 3300K、2360K 和 3250K. 虽然图 4.5-3 模型仍很粗糙，所得 P^+ 与动能关系比 (4.5-15) 式小，但是电离过程同电离能 ε_M 的指数关系与 (4.5-1) 式的实验关系式 $\exp[(e\Phi - \varepsilon_M)/kT]$ 符合相当好. 这是比较奇怪的，因为很难预料这种快速非静止过程会建立热平衡. 有效温度则高于 (4.5-14) 式给出的值，因为这时有效温度不仅依赖于基体的电子结构而且依赖于溅射原子的电子结构. 不过，由于所用的原子系统太小，不能与实验进行定量比较.

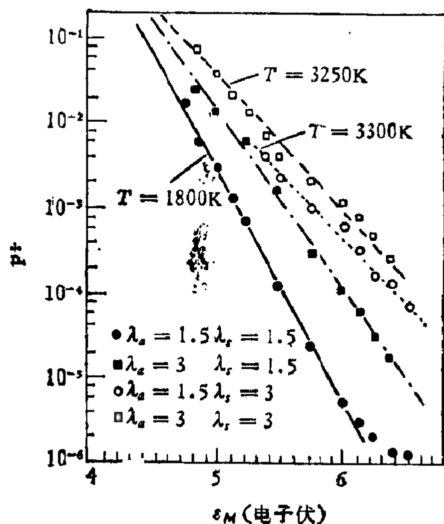


图 4.5-5 计算的电离产额 P^+ 同电离能 ε_M 的关系，λ 有各种组合[36]

如果考虑基体激发，则有可能得到更为合理的电离几率与动能的关系. 所以，仍用图 4.5-1 所示的模型，基体的温度为 T_s. 并且，为了简化求解，略去从轨道 $|a\rangle$ 非绝热转移到费米能量以上的空轨道 $|i\rangle$，也就是说，不考虑产生表示式 (4.5-13) 的过程. 当 $\varepsilon_a(0) = \varepsilon_a(\infty)$ 时，电离是由热力学平衡公式 $\exp[-(\varepsilon_M - e\Phi)/kT_s]$ 确定的，但是，如前指出的，它同实验符合不好. 为此，我们引入非平衡热力学过程，并且对不同电子结构的粒子电离过程也是不同的，也即是假定 $\varepsilon_a(0) \neq \varepsilon_a(\infty)$（我们所取的情况是 $\varepsilon_a(0) > \varepsilon_a(\infty)$）. 用 P 代表原子上携带正电荷，则 P 随时间的变化

$$\frac{dP}{dt} = -[P(t) - P_0(t)]/\tau(t) \tag{4.5-17}$$

和 $$\tau(t) = \hbar/2\pi V^2(t)\rho = \hbar/2\Delta(t) = [\hbar/2\Delta]\exp(2\lambda tv) \tag{4.5-18}$$

$$P_0(t) = \exp\{-[\varepsilon_F - \varepsilon_a(t)]/kT_s\} \tag{4.5-19}$$

溅射原子和基体之间的转移积分 $V(t)$ 由 (4.5-5) 式给出. (4.5-18) 式中的Δ与 (4.5-6) 式定义的 $\Delta(x)$ 相同. Δ的倒数正比于溅射原子和基体之间变换一个电子所需要的弛豫时间. P_0是时刻 t 溅射原子上的平衡正电荷. 为了简化求解,将 $\varepsilon_a(t)$ 作如下线性化:

$$\begin{aligned} \varepsilon_a(t) &= \varepsilon_a(0) \quad t < 0 \\ \varepsilon_a(t) &= \varepsilon_a(0) - [\varepsilon_a(0) - \varepsilon_a(\infty)]at \quad 0 \leqslant t \leqslant 1/a \\ \varepsilon_a(t) &= \varepsilon_a(\infty) \quad t > 1/a \end{aligned} \tag{4.5-20}$$

由于不考虑非绝热跃迁，所以因线性化而引入的不连续性不会影响结果. 在时间间隔 $0 \leqslant t \leqslant 1/a$ 内,有如下微分方程

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{2P(t)\Delta\exp(-2\lambda tv)}{\hbar} + \frac{2\Delta}{\hbar}\exp(-2\lambda tv) \times P_0(0)\exp\left(\frac{\delta at}{kT_s}\right) \tag{4.5-21}$$

式中 $\delta = \varepsilon_a(0) - \varepsilon_a(\infty)$.

在 $t = \infty$ 时的解为

$$\begin{aligned} P(\infty) = P^+ &= P_0(0)\exp\left[\frac{2\Delta}{\lambda\hbar v}\exp\left(-\frac{\lambda v}{a}\right)\right] \\ &\times \int_{\exp[-\delta/(kT_s)]}^{1}\exp\left[-\frac{\Delta}{\lambda\hbar v}y^{(2\lambda v kT_s/a\delta)}\right]dy \\ &+ P_1(\infty) = P_0(0)\left(\frac{\lambda\hbar v}{\Delta}\right)^{(a\delta/2\lambda v kT_s)} \\ &= \left(\frac{\lambda\hbar v}{\Delta}\right)^{(a\delta/2\lambda v kT_s)}\exp\left[-\frac{\varepsilon_F - \varepsilon_a(0)}{kT_s}\right] \end{aligned} \tag{4.5-22}$$

把 $\varepsilon_F - \varepsilon_a(\infty) = \varepsilon_M - e\phi$ 和 $v \propto \sqrt{E_1}$ 的关系代入，则上式可以写成

$$p^+ \propto (E_1)^n \exp\left(-\frac{\varepsilon_M - e\phi}{kT_s}\right) \qquad (4.5-23)$$

及

$$n = \frac{a\delta}{4\lambda kT_s v}$$

式中 δ 假定为常数，这就是(4.5-3)式所表述的电离系数同发射粒子能量之间的关系．采用某些合理的值，如 $\delta = 2$ 电子伏，$T = 3000\text{K}$ 和 $\lambda > 2.6a$，则可得到 $n < 3/2$．进一步研究表明离子实际形成是发生在距离 x_0 处，且满足如下关系：

$$\Delta(x_0) = \lambda v\hbar \qquad (4.5-24)$$

总之，非平衡热力学的研究定性上同实验符合很好，而且得到了(4.5-23)的半唯象关系式，正确地表达了 P^+ 同动能 E_1 和电离能量 ε_M 的关联，并通过参数 λ 和 a 把电离系数同溅射粒子和基体的微观性质联系起来．

概括起来，非绝热模型和非平衡热力学模型得到的结果如下：

(i) 电离几率 P 依赖于溅射粒子和基体之间的转移积分（特别是参数 λ）．

(ii) P 依赖于基体和溅射粒子之间势 $e\Phi$ 的空间关联．尤其是，非平衡热力学模型预言离子是在距表面 x_0 处形成的，满足 $\lambda\hbar v = \Delta(x_0)$ 的关系式，并且势为 $e\Phi(x_0)$．

(iii) P^+ 同基体的激发有关．

三　实验验证

检验电荷理论的实验常常是观察吸附原子次单层吸附作用引起离子产额的变化。由于吸附原子对表面的电子结构和表面势均有影响，为了同理论比较，实验上需要找到一个系统使上述两种变化分开．一般情况下，吸附原子同表面(如铯)结合不紧或者同基体原子的电子结构类似(如金属表面吸附着金属原子)、可改变表面势(即功函数)；而另外一些附着原子同基体原子的电子结构不同并和表面结合很紧(如金属表面吸附氧)，这种情况则主要影响表

面的电子结构(对功函数的影响就不大)．电离产额随表面电子结构的变化叫做“化学效应”．

因为钽表面吸附氧并不改变钽的功函数，所以用氧覆盖金属钽的样品来研究电子改变的影响比较适合．实验上观察钽离子电流随表面氧浓度 c_O 的关系示于图 4.5-6．为了得到产额变化的理论公式，我们假定 Ta^+ 离子产额仅依赖于最近邻氧原子的数目，也即是，Ta-O 键的数目．实验证明Ta-O 键的 λ(标记为 λ_O)大于 Ta-Ta 键的 λ(标记为 λ_T)，那么电离几率为

$$P^+ = w_0P^+_0 + w_1P^+_1 + w_2P^+_2 + \cdots + w_mP^+_m \qquad (4.5\text{-}25)$$

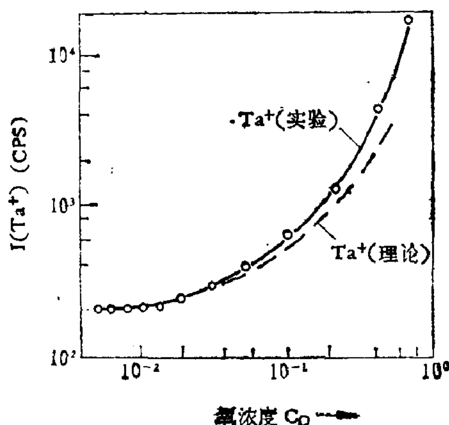


图 4.5-6 氧覆盖 Ta 表面溅射出 Ta^+ 离子强度同氧浓度 c_O 之间的关系．实线和圆圈是实验结果，虚线是理论结果．在 $c_O = 0.01$ 时，实验和理论一致[33]

式中 w_n 是 n 个氧原子处在溅射 Ta 原子最近邻的几率，m 是最近邻位置的数目．w_n 为

$$w_n = c_O^n(1 - c_O)^{m-n}\binom{m}{n} \qquad (4.5\text{-}26)$$

若溅射原子和基体之间有 $m-n$ 个键是 $\lambda = \lambda_T$ 而剩下的 n 个键则有 $\lambda = \lambda_O$，则可从 (4.5-4) 式算出电离几率 P_n^+，

$$P_n^+ = P_0 \cdot P_0^{-nd} \qquad (4.5\text{-}27)$$

式中

$$d = (\lambda_O - \lambda_T)/m\lambda_O \qquad (4.5\text{-}27a)$$

P_0 是近邻处没有氧原子时溅射 Ta 原子的电离几率．把 (4.5-27) 式代入 (4.5-26) 式即得

$$P^+ = P_0[c_O(P_0^{-d} - 1) + 1]^m \qquad (4.5\text{-}28)$$

当 c_O 小时此式简化为

$$P^+ \propto \exp[c_0 m(P_0^{-d} - 1)] \tag{4.5-29}$$

当 c_0 大时则有

$$P^+ \propto c_0^m \tag{4.5-30}$$

(4.5-28) 式的电离产额和实验确定中性 Ta^0 的产额之积绘于图 4.5-3 的虚线. 计算时取 $m = 5$ 和 $P_0 = 10^{-5}$, $d = 0.1$ 拟合最好. 当 c_0 大时理论同实验偏离较大,可能是因为理论上只考虑最近邻的原子. 在 Si:O, Nb:O, Nb:S 等系统中也发现 P^+ 同表面吸附体浓度之间的类似关系. 产额的增加不限于正离子; 负离子也存在但变化比较小。例如, Si^- 离子的强度也像 Si^+ 一样随表面氧浓度的增加而增加, 这是不能用功函数的变化来解释的.

在一个系统中若吸附原子只影响功函数, 那么,根据 (4.5-1) 和(4.5-2) 式可知电离同功函数变更之间的关系为

$$\begin{aligned} P^+ &\propto \exp(\Delta e\Phi / kT^+) \\ P^- &\propto \exp(-\Delta e\Phi / kT^-) \end{aligned} \tag{4.5-31}$$

因此, 功函数的变化对正负离子强度的影响正好相反, 这一点与 (4.5-25)—(4.5-28) 式所描写的电子变化的作用不同.

实验还看到 (4.5-31) 式中的有效温度 T^+ (或 T^-)对自相同基体溅射出不同种类原子是很不相同的, 这同局部热平衡概念是对立的. 因此, 上节中我们采用非平衡热力学模型来解释实验数据. 按照这个模型,有效温度 T^+ 和 T^- 的值依赖于表面静电场的空间分布 (偶极场) 和 $\Delta(x)$ 所描述的吸附原子-表面电子相互作

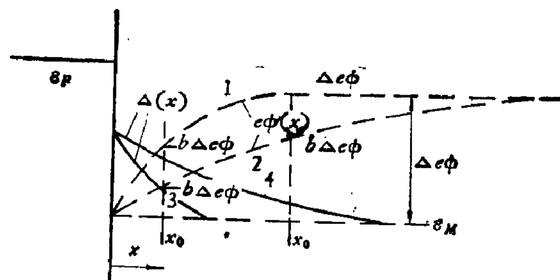


图 4.5-7 表面偶极势场(虚线 1 和 2) 和价能级宽度 (实线 3 和 4) 离表面距离 x 关系的示意图. x_0 满足 $\Delta(x) = \hbar\lambda v$ 的点. 总偶极场的变化为 $\Delta e\Phi$, x_0 处的场标记为 $b\Delta e\Phi$

用的空间关联．特别是，这个模型预言了离子是在离表面 x_0 处形成的，而且有 $\Delta(x_0)=\hbar\lambda v$．由于不同距离 x_0 处的偶极场不同，所以溅射原子能级的能量，也即电离过程取决于偶极场和 $\Delta(x)$ 空间分布之间的关系，见图 4.5-7.

虚线表示表面势场的空间关联，虚线 1 代表比虚线 2 变化快的场，实线 3 和 4 代表两个 $\Delta(x)$，溅射原子的电离势为 ε_M．1 和 2 势的总变化都等于 $\Delta e\Phi$．临界距离 x_i 满足 $\hbar\lambda v=\Delta(x)$，相应的势 $b\Delta e\Phi$．故电离几率为

$$P^{+}\propto \exp(b\Delta e\Phi/kT_s) \qquad (4.5\text{-}32)$$

式中 $b\leqslant 1$，所以 $T_{eff}=T_s/b\geqslant T_s$.

由图 4.5-7 看出，当偶极性吸附原子大（情形 1）或当溅射原子小（情形 3）时，b 应该小。这为观察金属钨溅射 W^+ 的强度与 $\Delta e\Phi$ 的关系实验所证实．将 Cu、Pd 和 Y 分别沉积到 W 上可改变功函数（见表 4.5-1）．对 W-Cu 系统取 $b=1$ 和 $T_{eff}=T_s=3400$K 以把数据归一化．一般来说，电离能量大，吸附原子半径小．吸附在 W 表面上的 Cu、Pd 和 Y 具有正电荷，而吸附在 Nb 上的 Pd 是负离子．负离子半径大于正离子半径，因此，Nb:Pd 的 b 值比

表 4.5-1 自不同吸附原子（Cu,Pd,Y）覆盖钨表面溅射出 W^+ 离子的有效温度 T_{eff} 和 b 值，以及吸附原子电离能 ε_M 和半径 r

系统	离子	ε_M（电子伏）	r(Å)	T_{eff}	b
W:Cu	W^+	7.7	2.55	3400	1
W:Pd	W^+	8.33	2.74	3700	0.92
W:Y	W^+	6.5	3.62	11700	0.29

W:Pd 的 b 值小．实验结果证明了这个预言，而且在 Nb:Pd 系统中 b 等于 0.15.

用离子轰击 GaAs 溅射 Ga^+ 和 As^+ 可以看出溅射原子半径对电离几率的影响。这两个离子具有非常不同的电离能量（$\varepsilon_M^{Ga}=6$ 电子伏．$\varepsilon_M^{As}=9.8$ 电子伏），因此，Ga 的原子半径比 As 大．按照非平衡热力学模型，关系式 $b_{Ga}>b_{As}$ 成立．用铯（Cs）覆盖 GaAs 表面改变功函数，可以得到 $T_{Ga}=7000$K 和 $T_{As}=24000$K．取

Ga 的 $b=1$，则 As 的 $b=0.29$。

虽然溅射粒子的电离过程是很复杂的，但是，通过一系列理论模型和实验研究，对其机理在定性上有一定理解，而不能在定量上预知电离几率，其原因或是概念上过于简单或是使用的原子簇（5个基体原子）系统不大符合实际．在这方面，如果采用更符合实际系统来对电离过程进行计算机模拟，并且把理论结果同角分辨二次离子质谱（SIMS）的精确实验数据相比较将是很有前途的．

§4.6 二次离子质谱（SIMS）

由前面讨论可知，溅射离子的发射包含着两个过程：溅射过程和电离过程．所以，二次离子强度可以写成：

$$\text{离子强度}=\text{溅射过程}\times\text{电离过程} \qquad (4.6\text{-}1)$$

实验上探测溅射二次离子往往只是总溅射粒子很小的一部分．仅管如此，用它来对样品表面作质谱分析，从而给出样品表面的浓度分布和深度分布已成为现代科学技术中一个重要的微分析手段．这是因为：它的灵敏度很高，利用现有的质谱仪和探测技术就可分析 $10^{-18}A$ 的二次离子；还能在超高真空下测量，避免表面污染．当然，也可使用这种方法探测过电离的中性溅射粒子，但是，中性粒子只有同比较密集物质相互作用才会发生过电离，故要用辉光放电（即等离子体）条件．或者使用飞行时间法来检测．这里不细说明．

一　二次离子质谱的实验条件

二次离子质量分析仪是由于离子枪、二次离子收集和聚焦系统、质量/电荷分析的质谱仪以及离子探测系统．图 4.6-1 给出两种不同的仪器安排：(a) 发射显微镜，(b) 微探针．现将实验要求加以说明．

(1) 轰击条件

轰击条件是要提供足够的溅射粒子以便分析，这里最重要的

因素是轰击离子的能量而不是离子的特性，如(4.2-30)式和图4.2-8. 当轰击粒子能量低于1千电子伏时，许多物质的溅射产额很低，而轰击能量高于20千电子伏时溅射产额不会增加多少，甚至在高能时还会降低(图4.2-8). 因此，大多数离子枪都是使用1—20千电子伏的能量范围.

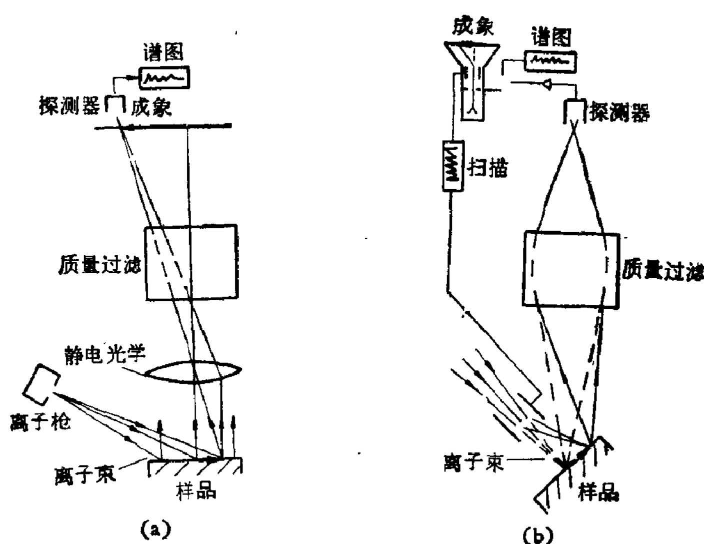


图4.6-1 二次离子质谱实验装置示意图
(a) 发射显微镜；(b) 微探针式

根据图4.2-7，只有入射束的方向超过大约70°时，溅射产额才明显下降. 原则上任何种类离子均可用于溅射，但由图4.2-6可看出，轻离子(质子和 He^+ 离子)不适合，因其溅射产额很低. 根据要求可有两种轰击方式：

(i) 离子轰击不改变样品的化学条件. 常用惰性气体正离子，如氩离子.

(ii) 离子轰击改变样品表面的化学状态，如氧，(可用 O^+，O_2^+ 或 O^- 离子)

(2) 空间和深度分析

用二次离子质谱进行空间分析有图 4.6-1 所示的两种方式，即发射显微镜和微探针方式.

在发射显微镜[图 4.6-(a)]中，用密度均匀的初离子束轰击大面积样品，在仪器聚焦平面上得到样品表面共点的离子成象．成象的面积直径是 250 微米，空间分辨率好于 1 微米.

在微探针设计(图4.6-1b) 中，初束在样品表面上聚焦成一点，直径大小为几个微米．两对偏转极可使束斑点对表面扫描．二次离子束聚焦到出射缝，从而可获得点对点的成象．要达到表面的二次离子成象，还应使束斑扫描与带有二次离子探测器的阴极射线管的电子束同步．空间分辨率是 2 微米.

在进行深度分析时，如果深度要达几个微米，则要求初束流有足够的密度，以得到合理的腐蚀时间：通常用 10 微安/厘米^{2}到 10^3 微安/厘米^{2}在平均密度为 100 微安/厘米^{2}和几个千电子伏能量的初离子束，固体表面腐蚀率一般为 1 原子层/秒(表 5.6-1)，这种高腐蚀率的二次离子分析叫“动态”分析．表面移去的是仅依赖于表面所受到初离子总剂量．而不依赖于剂量随时间的变化．这意味着采用上述初束密度仅管表面腐蚀率高，但仍能进行单原子层的深度分析.其好处是用强流离子束对样品进行很短时间的轰击，每次轰击期间用质谱仪同时探测所有二次离子．另外一个方法是在很短的时间内(如～10^{-3} 秒)计数二次离子，不断地送到多道插件并把它放到存贮器中．实际上，在单原子层的表面分析中常用

表 4.6-1　二次离子质谱分析条件

	静态条件	动态条件
真空度(托)	10^{-10}	10^{-7}
初离子束能量(千电子伏)	～3	6—15
初束流密度(微安/厘米^2)	10^{-3}—10^{-1}	10—10^3
分析面积(厘米^2)	10^{-1}	5×10^{-4}
腐蚀率(原子层/秒)	10^{-5}—10^{-3}	10^{-1}—10

很低的离子密度（$\sim10^{-3}$—10^{-1} 微安/厘米，见表 4.6-1）以便材料的消耗小于 10^{-4} 单原子层/秒[17]．记录整个一个谱所需的时间约 400 秒，材料的消耗大约是单原子层的百分之一．因此，可以认为所记录的谱是代表给定表面组分的特征．这叫做“静态”二次离子质谱．轰击的面积约 0.1 平方厘米．这种方法还不能进行空间分析．

(3) 化学分析

要进行化学分析时，首先把收集的样品表面发射的二次离子用静电光学系统加以聚焦，再送到质谱仪中．用磁分析器或四极质谱仪进行质量/电荷分离，质量分辨率一般不超过 $M/\Delta M=300$．由于分子离子谱的存在(后面讨论)，所以质量分辨率要求较高．

从分析的角度看，主要参数是仪器灵敏度，这同溅射原子在化合物样品中的浓度．溅射率和电离过程均密切相关．因此，仪器灵敏度对同一样品发射不同种类的原子是不同的．在利用四极质谱仪时，二次离子进入分析器前加速的能量不能超过 50—100 电子伏，效率比较低(因质谱仪的入口缝窄)．在作其它分析仪时，样品表面可加强电场（$\sim$1000 伏/毫米），有利于收集离子，效率可达 1/10．

化合物样品总是多元素的，不同元素溅射产额不同(见 § 4.4 的第三段）会使溅射腐蚀表面的元素组分与本体内不同．这给分析结果的准确性带来困难，但是，在“静态”条件下，表面组分可以调正使得表面覆盖率 θ_i 乘以溅射产额 Y_i 所给出溅射通量 θ_iY_i 正比于样品本体中元素 i 的原子分数．当然这个假设是在表面没有热蒸发和本体-表面没有扩散的情况下成立的． 仅管元素的溅射产额非常不同，溅射通量却反映着原材料的组分．

二　多组分的 SIMS 分析

二次离子质谱学（SIMS）的中心问题是如何记录二次离子强

度并把它同腐蚀样品的组分联系起来．通常把发射离子的溅射过程和电离过程分开处理．如果初离子束流强度是 I_0，相应于元素 M 本体浓度 $c(M, x)$ 的溅射离子 M^+ 的强度为

$$I(M^+, x) = P(M^+, x)c(M, x)Y_T(x)I_0 \quad (4.6\text{-}2)$$

式中 $P(M^+, x)$ 是电离几率，由(4.5-1)或 (4.5-2) 式给出．$c(M, x)$ 是元素 M 的原子浓度，并设

$$c(M)_{溅射} = c(M)_{固体} = \frac{N_M}{\sum_i N_i}.$$

$Y_T(x)$ 为 (4.1-1) 式定义的总溅射产额．如果 $Y_T(x)$ 和 $P(M^+, x)$ 在样品表面腐蚀过程中是一个常数，则深度剖析就直接可通过 $I(M^+, x)$ 和 $c(M, x)$ 的关系得到．这在浓度低组分分布均匀的情况下是合适的．一般情况需要校正，因为 $P(M^+, x)$ 和 $Y_T(x)$ 是变化的．

由 § 4.5 可知，电离过程是复杂的，二次离子产额同固态表面条件和初离子束的关系都很大．斯罗汀恩 (Slodzian) 和汉莱津 (Henneguin) 首先发现固体表面吸附氧增加二次离子产额．安德逊则证明 O^+ 作为初离子会增加正的二次离子产额，而入射 Cs^+ 离子则增强负的二次离子产额．由 (4.5-27) 式和图 4.5-6 看出，溅射离子产生效率取决于有关元素的化合键，例如，电离性键的碱金属卤化物有较大的电离效率．另外一种看法是，溅射过程中大多数溅射粒子都会电离，而上面观察的结果可解释为离子在接近表面处由中性化过程而失去电荷，变成中性粒子．根据氧是负电性而铯是正电性的特性，认为确定中性化效率的因素是“电子的利用率”．这也为实验所证实(下一节将要说明)．

如果溅射出现多电荷离子和分子离子，情况就要复杂多了．仅管在表面很干净时这些离子产生的强度很低(图 4.6-2)，但由于质量相干和不同电离效率所引入不确定性给分析带来困难．不过这些复杂离子提供不少化学信息，对研究表面动力学过程很有用[37]．图 4.6-2 是污染钒表面正负二次离子静态质谱．确实可得到丰富

的信息.

二次离子质谱在本体分析、剖面分析和成象技术中的应用较早．而对表面反应的研究更有希望,同其它表面分析(如俄歇电子谱学)比较,静态二次离子质谱可提供：探测包括氢元素在内的所有元素(特别是碳氢化合物);探测络合物(对多种元素的灵敏度均很高)．同位素的灵敏度以及在发射离子簇时“横向分辨率”可达原子间距离的范围.

由于各种环境气氛,如暴露于气体、加热、离子、电子或光子轰击,均使固态表面区域化学结构发生变化,因此，利用不同的方法从 SIMS 中得到这些表面反应过程的信息,如:

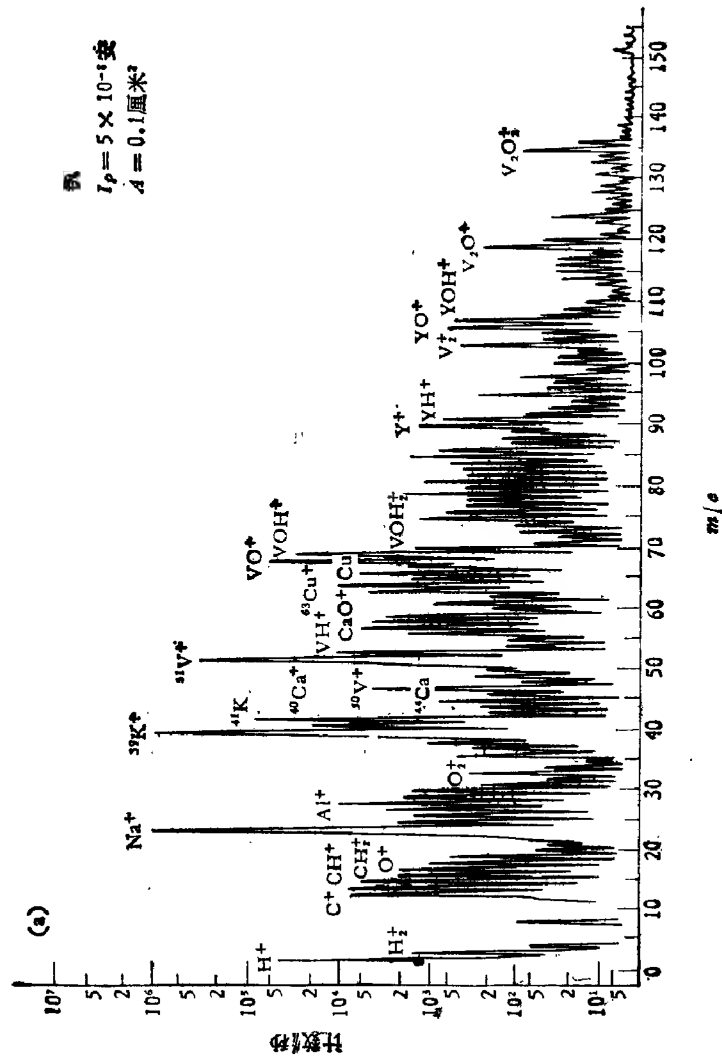
(i) 静态二次离子谱给出任何反应阶段表面组分和表面原子短程有序(通过离子簇)的信息.

(ii) 用控制溅射确定表面反应得到的表面层厚度和组分.

(iii) 用同位素方法研究相同组分(例如,氢或氧原子)不同的表面束缚态以及这些态之间的交换.

例如，仔细研究 V_2O_5[23] 及室温下清洁多晶钒同 O_2[26] 和 (H_2+O_2)[33] 相互作用的二次离子发射很有意义．一个氧饱和钒表面[氧剂量大于 100 朗缪尔 (Langmuir)] 的二次离子产额 $Y(V_mO_n^{\pm})$ 类似于 V_2O_5 样品,表明室温下钒表面形成了氧化层.此外,还探测到两个电子灵敏的氧态,β_1 和 β_2(图 4.6-3 中的 O_2^+),它们对250eV 电子的退吸截面分别为 10^{-16} 和 10^{-19} 厘米^2．β_1 态同发射 VO_3^-, VO^+ 和 VO_2^+ 联系密切，而发射 VO^- 和 VO_2^- 同 β_2 态没有直接的关系．β_2 态相当于单个氧原子束缚到单个钒原子上．图 4.6-4 是清洁钒表面溅射出各种二次离子相对强度同氧剂量 (即表面覆盖氧的浓度)的关系.其复杂特性可用类似图 4.5-7 和 (4.5-27) 式的价能级模型来定性描述.

如果采用同位素技术,可得到表面反应机理更多的信息.当充氧剂量超过 100 朗缪尔时二次离子发射基本上没有变化了 (图 4.6-4 所示)．显然，最外层氧原子浓度变成常数.如果现在把 $^{18}O_2$ 换成 $^{16}O_2$ (图 4.6-5)，那么发射 $V^{18}O^-$ 减少了，发射 $V^{16}O^-$ 却增加



(a)
$I_p = 5\times10^{-8}$ 安
$A = 0.1$ 厘米²
计数/秒
m/e
H^+
H_2^+
C^+ CH^+
CH_2^+
O^+
Na^+
Al^+
O_2^+
$^{39}K^+$
^{41}K
$^{40}Ca^+$
$^{50}V^+$
^{44}Ca
$^{51}V^+$
VH^+
$^{63}Cu^+$
CaO^+
Cu
VO^+
VOH^+
VOH_2^+
Y^+
YH^+
V_2^+
YO^+
YOH^+
V_2O^+
$V_2O_2^+$

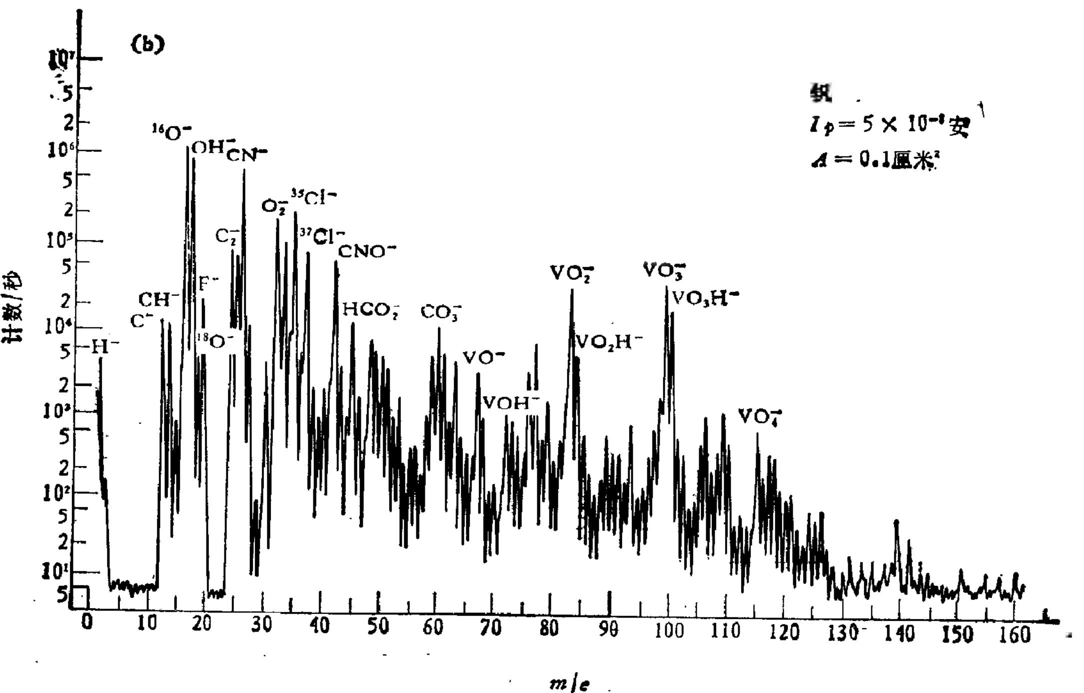


图 4.6-2 污染钒表面的正 (a) 和负 (b) 二次离子质谱，强度是对数坐标，钒的本体浓度小于 5×10^{-4}[37]

了，而 VO^- 强度之和仍然是常数。显然，又有氧加入"饱和了"的表面上。表面一部分被替代的氧可以退吸也可能穿透到更深的层。

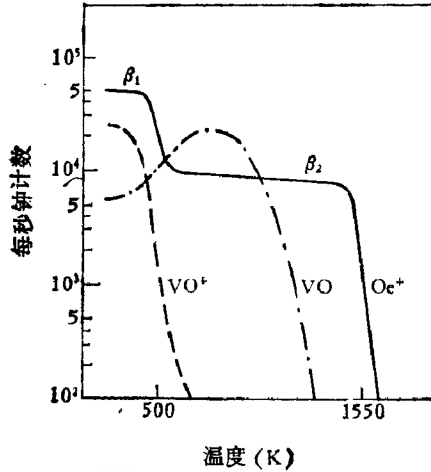


图 4.6-3 从氧覆盖钒表面溅射（VO_1^-；VO_1^+）离子以及电子感生（O_e^+）变化同温度关系[37]

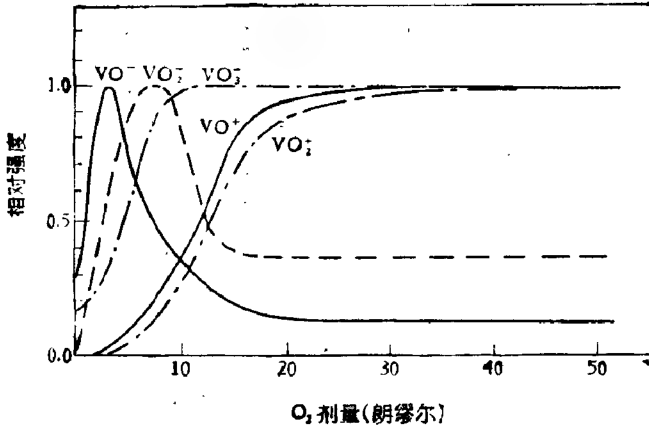


图 4.6-4 清洁钒表面充氧过程中二次离子发射的变化[37]

若钒表面已经覆盖氧，再充以氢，二次离子发射谱如图 4.6-5，其中包括含氢的离子簇，这表明，在表面上有 H_2O（$H_2O^\pm$，$O_2H_2^\pm$，$VOH_2^\pm$，等）和 OH 类（OH^-，VOH^+ 等）。

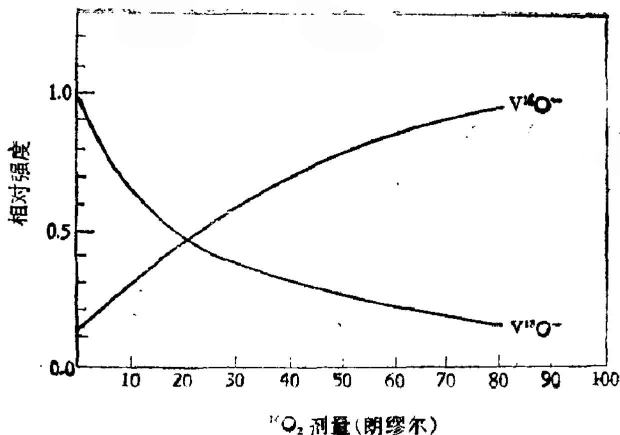
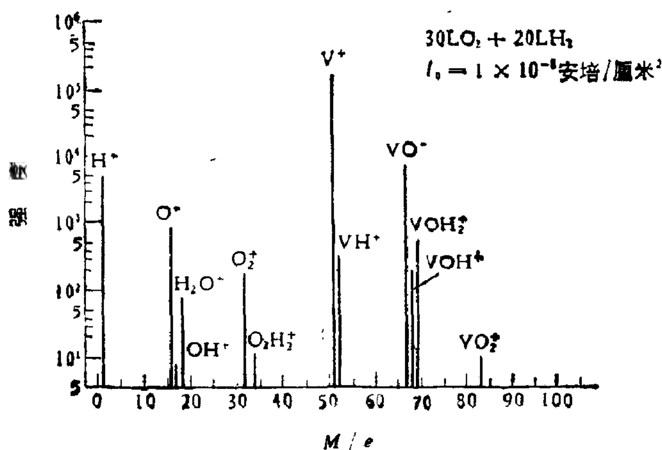


图 4.6-5 用 SIMS 同位素法研究表面反应[37]



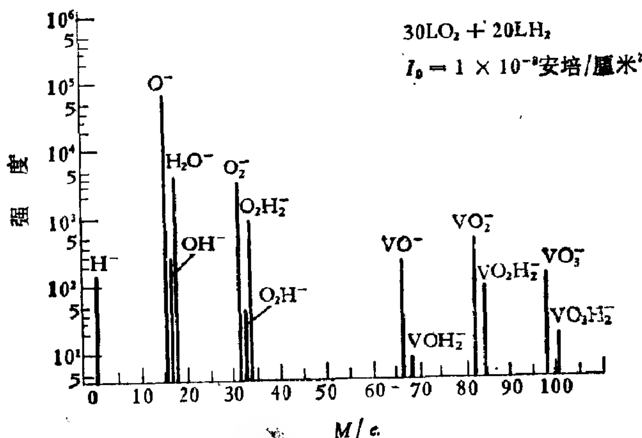


图 4.6-6 三种组分的表面反应：钒表面经 20 朗缪尔氢作用和 30 朗缪尔氧作用后发射二次离子，发射 $VO_2^\mp$ 表明钒表面氧化，[取自 A. Benninghoven, C. Plog, H. Fehmer, and K. H. Mueller, *Verh. Dtsch. Phys. Ges*, **6** (10), 584 (1975)]

三 金属离子簇溅射

上节已经谈到，多元素靶受到低能离子轰击时，在发射的许多二次离子中存在着多原子构成的带电集团（图 4.6-5），叫离子簇 (ion cluster)．由于组分不同，又称聚合离子，分子离子等等．例如，纯金属靶产生 $M_n^{\pm}(n=1,2,3\cdots)$；合金靶产生 $Cu_mBe_n^{\pm}(n, m=1,2,3\cdots)$；化合物靶（如图 4.6-6）则有 $M_nO_m^{\pm}(n, m=0, 1, 2\cdots)$．它们的发射强度、离子簇种类的多样性及其结构令人费解，引起理论和实验物理学界的很大兴趣．它可能是介于气态和固态之间的物质新状态．现在，人们正在用光致分离或激光感生离子-分子反应来研究这类金属离子簇的结构和动力学性质．这将是填补原子物理和固体物理之间的空白[38]．

(1) 离子簇质谱

溅射离子簇由于靶的组分和结构不同以及溅射条件的差异有如下类型：

(i) 单元素 M 的纯金属固态材料作为溅射靶时发射的离子簇具有 $M_n^{\pm}$ 的形式，叫聚合离子．一般情况下，离子簇流的发射强度 $I(M_n^{\pm})$ 随 n 的增大而减少．但从质谱来看，也有两种．一类是离子簇的强度曲线 $I(M_n)$ 随原子簇中原子数目 n 增加而单调减少．在半对数坐标中大致是一个线性关系，如图 4.6-7．轰击的离子为 6 千电子伏的氩离子 (A^+)，靶为铝铜合金（其中铜的含量占 40%），得到各种离子簇质谱．由于 Cu 的含量很少，这种合金中产生 Al_n^+ 聚合离子谱与纯 Al 靶是一样的．

另一类 1A 和 1B 组元素（如 Cu、Ag、Li 等）和 IVA 组的非金属元素 (C, Si) 的质谱中，离子簇的发射强度随 n 奇偶变化，其曲线呈振荡特性，如图 4.6-8 和图 4.6-9．而且，在 Cu_n^+ 离子簇中 n 为单数结合的几率大于 n 为偶数的，即 $Cu_{2P+1}^+ > Cu_{2P}^+ (P=0, 1, 2\cdots)$；而 C_n^- 负碳离子簇的情况正相反，$C_{2P}^- > C_{2P+1}^-$．

(ii) 多元素靶形成的杂核离子簇．除了如图 4.6-3 至图 4.6-

6 所描写的各种氧化物形成的分子离子，$M_nO_m^{\pm}(n, m=0, 1, 2 \cdots)$ 外，合金靶形成的两种金属原子结合在一起的离子簇，如图 4.6-6 中 Al_nCu^+，$Al_nCu_2^+$ 等。如果是金属和非金属化合物，如 FeC，

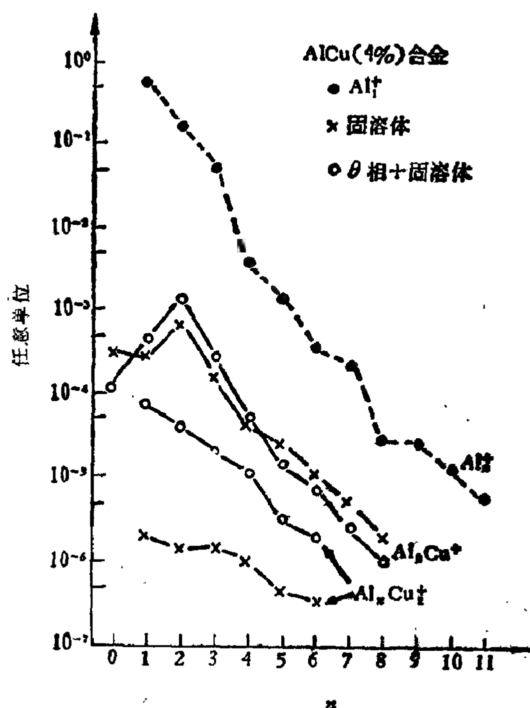


图 4.6-7　6 千电子伏 Ar^+ 轰击 AlCu(Cu 仅为 4%)合金靶得到的离子簇[17]

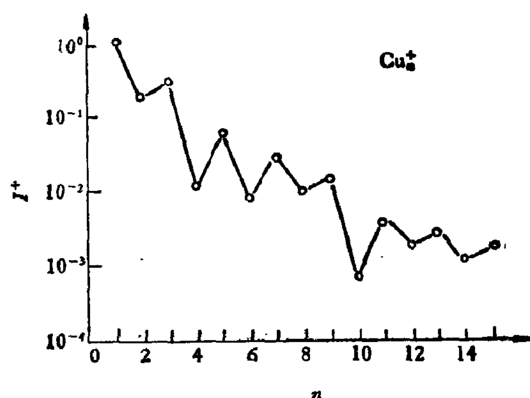


图 4.6-8　11 千电子伏 Ar^+ 轰击多晶铜的 Cu_n^+ 离子簇质谱

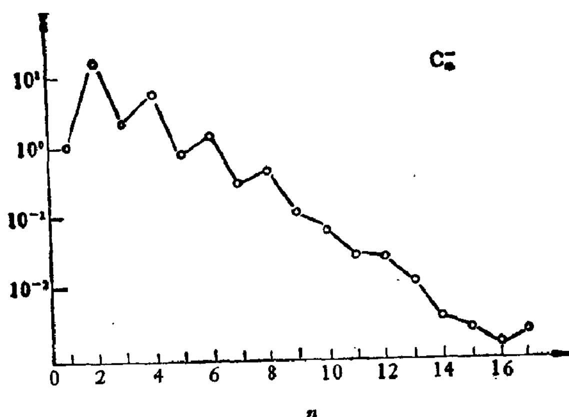


图 4.6-9 6.5 千电子伏 Ar^+ 离子轰击石墨得到的 C_n^- 离子谱[39]

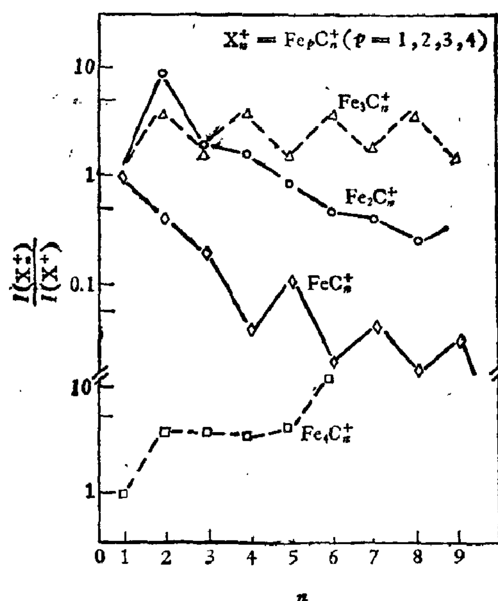


图 4.6-10 $Fe_pC_n^+(P = 1, 2, 3, 4)$ 发射的相对强度同碳原子数目 n 的关系(为火花放电源)[34]

得到了 $Fe_pC_n^+(p = 1-4)$ 离子簇的发射强度同原子数 n 的关系(图 4.6-10)。其中，$Fe_1C_n^+(p = 1)$ 和 $Fe_3C_n^+(p = 3)$的发射强度随碳原子数 n 的奇偶有振荡变化，前者 n 为偶数时强度大，后者是 n

为奇数时几率大. 而且 $p=3$ 的 $Fe_3C_n^+$ 发射的强度远高于 FeC_n^+ (图 4.6-10).

(iii) 特殊的氩离子簇,当氩气打入 330℃ 铝时,能观察到很强的 A_n^+ 离子簇发射,其 n 数可达 18,同时也产生大量的 A_nAl^+ 和 $A_nAl_2^+$,如图 4.6-11 所示. 这是一种很奇怪的离子集团,可能是氩进入高温铝晶后聚集成"泡",称"氩泡",然后发射出来. 而惰性气体氩在自由状态是不可能形成集团的.

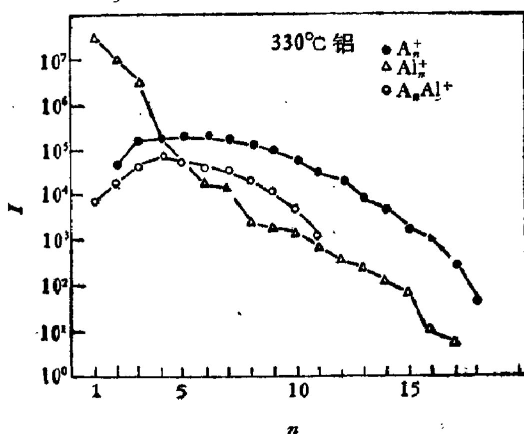


图 4.6-11 含"氩泡"的铝晶发射的分子离子[17]

离子簇质谱的这些特异行为值得深入研究. 例如,化合物的化学剂量并不会对产生类似组分的离子簇有利. 但是,金属内部不同的相却对离子簇的形成有较大影响. 譬如,铜铝合金是一个固溶体,经 330℃ 退火,使铜以大小约为 1 微米的小颗粒沉积下来,组分为 Al_2Cu,是 θ 相. 由图 4.6-7 看出,$Al_nCu_2^+$ 离子在固溶体相和 θ 相中很不相同:含有 θ 相 Al_2Cu 的合金中 $Al_nCu_2^+$ 离子发射强度远大于固溶体相中的强度,而 Al_nCu^+ 离子发射的差别就不大. 说明溅射分子离子的研究可提供样品结构状态信息. 至于金属离子簇,现在试图用聚集物的电子结构来定性地解释它们的形成,但不能说明图 4.6-8 至图 4.6-10 所示的奇偶性变化.

(2) 离子簇发射

低能离子轰击固体表面，发射几个原子并形成一个分子起码要有三个条件:

(i) 发射诸原子之间的距离必须是分子内原子间距，最合适的条件是从表面上相邻部位发射这些原子.

(ii) 形成一个离子簇的所有原子必须同时发射. 若一个初碰撞可同时发射 $1,2,3,\cdots n$ 个原子的几率是 $f_1, f_2, f_3, \cdots f_n$, f_n 显然随 n 的增加而减少. 当粒子组合数目愈来愈大时，离子分子的强度必然下降很快.

(iii) 构成一个离子簇的原子的发射速度必须具有大致相同的方向和大小.

这些条件要求多原子构成的离子簇最初具有平面结构的形式,在飞行过程中可能会重新排列.

由两个自然丰度 c_A 和 c_B 同位素的元素 A 和 B 构成的一个固体，常观察到含有 $n+m$ 个原子的各种离子簇 $A_mB_m^+$ 的强度正比于 A 和 B 的同位素丰度:

$$I(A_mB_n^+)\propto \frac{(n+m)!}{n!m!}c_A^n c_B^m \qquad (4.6\text{-}3)$$

这个规律是从原子是随机分布且没有考虑发射过程本身的机理.

(4.6-3) 式进行适当调整，使其符合溅射中形成离子簇的条件. 若原子 A 同其最近邻相连，A 和 B 是随机分布的，在 A 周围找到 A 和 B 的几率分别是 c_A 和 c_B,那么，找到 AA 和 AB 联合体的几率也分别正比于 c_A 和 c_B. 由于 c_A 是 A 的本体浓度,会得到 c_A^2 个 AA 联合体和 c_Bc_A 个 BA 联合体.同理,对于 B 原子,可得 c_Bc_A 个 BA 联合体和 c_B^2 个 BB 联合体. 所以，AA、AB 和 BB 联合体的总数分别是 c_A^2, $2c_Ac_B$ 和 c_B^2. 这就是 (4.6-3) 二项式给出的结果，不过从形成离子簇原子在表面的位置得到的. 这种离子簇形成方式可以很容易推广到 3、4 … 原子的情况,只是每个原子均需同它的最近邻构成链式连结.

上述原子聚集的描述是很通用的，不管什么类型的原子、同位素、只要是随机分布的，本体浓度 c_A 和 c_B 和每个原子周围的局部浓度相同均适合. 如果固体靶具有一定结构(晶格或不同的相)，本体浓度和每个原子周围的"局部浓度"不同，(4.6-3)式不再满足. 但是，离子簇的数目总是正比于发射原子数目，也即是，正比于总溅射产额 Y_T. 于是，我们定义产生离子簇的"膺溅射产额"

$$Y_{A_mB_n} = f_{m+n}F_{m,n}(c_A, c_B, a, b)Y_T \qquad (4.6\text{-}4)$$

式中 f_{m+n} 是一次轰击同时发射 $m+n$ 个原子的几率，$F_{m,n}$ 同元素的浓度 c_A、c_B 和固体表面结构状态 (α, β, a, b) 等参数有关，称为结构因子. 根据固态是无序还是有序结构，$F_{m,n}$ 分别由(4.6-3)式或表 4.6-2 推出.

表 4.6-2　材料为有序时的结构因子

局部浓度		簇(联合体)	产生几率
本体浓度	A (c_A) $\xrightarrow{a}$ A	AA	c_Aa
	A (c_A) $\xrightarrow{b}$ B	AB	c_Ab
	B (c_B) $\xrightarrow{\alpha}$ A	BA	$c_B\alpha$
	B (c_B) $\xrightarrow{\beta}$ B	BB	$c_B\beta$

由(4.6-4)式，含有两种元素原子簇发射强度的一般表达式为

$$I(A_mB_n^{\pm}) = f_{m+n}P(A_mB_n^{\pm})F_{m,n}(c_A, c_B, \alpha, \beta)Y_TI_0 \qquad (4.6\text{-}5)$$

$P(A_mB_n^{\pm})$ 是电离几率，I_0 为初离子束强度. 显然，发射强度同固体表面结构关系密切.

如果表面有氧吸附，$c(M)$ 和 $c(O)$ 分别是金属和氧原子的表面浓度，$M_mO_n^{\pm}$ 离子发射的结构因子是:

$$F_{m,n} = \frac{(n+m)!}{n!m!}c(M)^m c(O)^n \qquad (4.6\text{-}6)$$

$$= \frac{(n+m)!}{n!m!}[1 - c(O)]^m c(O)^n \qquad (4.6\text{-}7)$$

此时发射各种离子强度与表面吸附氧的关系如图 4.6-4. 不过还有本征金属离子和纯金属离子簇 $M_m^+ (m \geq 2)$ 的存在，图中没有列出. 图 4.6-12 给各种离子发射强度同氧气压的关系. 纯金属离子发射强度 $I(M^+)$ 在低压端有一平台，然后很快上升，当表面氧饱和时达到一个高平台；$MO_n^+ (n \neq 0)$ 类似于图 4.6-4 中的 VO^+ 和 VO_2^+；纯金属离子簇 $M_m^+ (m \geq 2)$ 的 $I(M_m^+)$ 曲线在一定氧气压处呈极大值. 根据单金属离子发射强度 $I(M^+)$ 可知，表面吸附氧会增强离子发射，而随着表面氧覆盖的增加，产生 M_m^+ 离子簇的结构因子 $F_m(M_m^+)$ 不断地减少，从而使 $I(M_m^+)$ 减弱. 两者竞争的结果使 $I(M_m^+)$ 曲线出现了峰值.

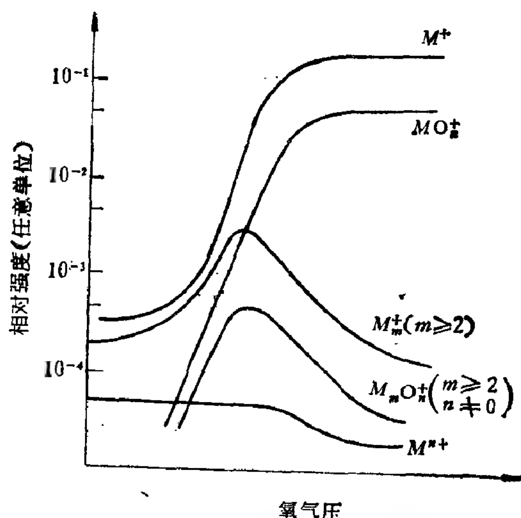


图 4.6-12 各种离子发射强度随表面吸附氧(氧气压)之间关系

至于晶格结构以及固体内部处于不同的相对离子簇发射的影响还未系统研究过. 不过，由于晶格结构对入射离子的穿透和二次离子发射均有直接的影响 [见第五章沟道效应和图 4.2-24、图 4.2-25、图 4.2-26、图 4.2-27 和 (4.2-60) 式]，可以预见对离子簇的发射也有直接的影响.

(3) 离子簇的形成

离子簇的理论同微粒物理的发展密切联系着．早期的工作主要是中性粒子团．在离子簇发现之后，对这种超细带电微粒-带电原子集团的形成机理产生了较大的兴趣，突出的工作是由焦意斯(Joyes) 和莱利特 (Leleyter)[40] 等人做的．

现在来考虑固体表面发射原子形成初始原子簇(平面结构)向稳定的电离分子结构的演化过程．开始，簇原子形成一个膺分子，具有很高的振动能量，如铜分子 Cu_2． 图 4.6-13 给出相应于 Cu_2 和 Cu_2^+ 两个基本结构的势能曲线．当两个原子之间的距离 R 达到约三个原子单位 (即，～1.5 Å)时，两能势曲线有一交点 A．这样，如果两原子在金属表面时位置相邻，以大致相同的条件发射，并在飞行过程中当两原子距离小于三个原子距离 (<3a.u.) 时，形成分子并有一定几率变成 Cu_2^+ 的结构，即发射一个电子而成离子簇．当然，Cu_2^+ 这时是分解成 $Cu^+ + Cu$ 呢，还是构成稳定的分子离子，取决于系统的势能是否超过变成 ($Cu^+ + Cu$) 的离解能 ε_D^+．由图 4.6-12 可以看出，A 点的势能没有超过 ε_D^+，并且，由于发射了电子，使系统动能转变为电子的能量而稳定下来．因此，离子簇形成的条件取决于

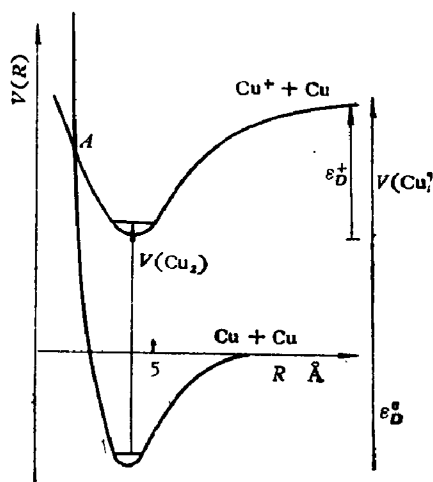


图 4.6-13 Cu_2 和 Cu_2^+ 态能量示意图．ε_D^+ 为离子簇的离解能

(i) 中性原子簇的电离能 $V(A_nB_m)$；

(ii) 离子簇的离解能 ε_D^+．

$V(Cu_2)$ 愈小，ε_D^+ 愈高，则离子簇形成的几率愈高．实验证明，

离解能是主要的，并有如下规律：含 n 个原子的离子簇发射强度 $I^+(n)$ 同 n 的关系与这些簇每个电子的离解能有相同的量级。

实验测量离子簇强度 $I^+_{exp}(n)$ 同 $I^+(n)$ 的关系为

$$I^+_{exp}(n) = f_n I^+(n) \tag{4.6-8}$$

f_n 由(4.6-4)式给出，为一次初碰撞有 n 个原子同时发射的几率。若 f_n 随 n 单调减少，上述规则也适用于测量的离子簇强度 $I^+_{exp}(n)$。图 4.6-14 给出符合这个规则的两个例子：Cu_n^+ 和 Be_n^+。

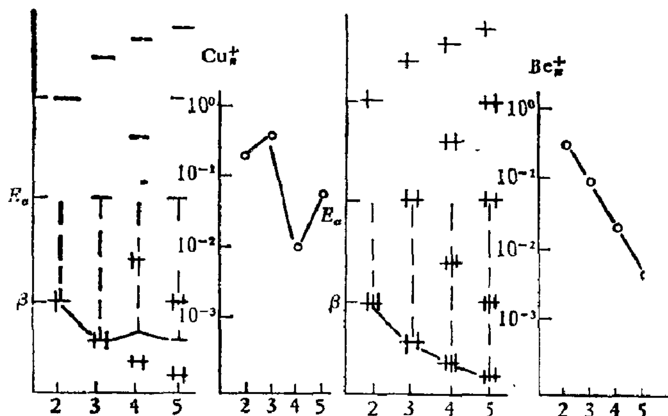


图 4.6-14 $Cu_n^+(a)$ 和 $Be_n^+(b)$ 的能级图(取 Hückel 近似)。虚线箭头表示束缚能并同离子簇的强度比较[17]

在一级近似下可假定 Cu 和 Be 原子 4s 和 2s 能级的电子分别决定着 Cu_n^+ 和 Be_n^+ 离子簇的束缚能。令 E_s 是 s 能级的能量。在霍克耳 (Hückel) 近似中，含有 n 个原子的簇具有 n 个能级，并由下式给出

$$\varepsilon_j = E_s + \beta h_j \qquad j = 1, 2, 3 \cdots n \tag{4.6-9}$$

式中 $\beta < 0$ 是转移积分常数。对线性链式结构

$$h_j = 2\cos\frac{j\pi}{n+1}.$$

含有 n 个原子的离子簇(电离后)的电子能量由 $(n-1)$ 个电子给出，即

$$E_e^+(n) = \sum_{i=1}^{n-1} \varepsilon_j(i) = (n-1)E_a + \beta \sum_{i=1}^{n-1} h_j(i)$$

(4.6-10)

(4.6-10)式中取和应把2个电子 i 放到每个 i 能级上．束缚能是由

$$\varepsilon_e^+(n) = E_e^+(n) - nE_a = -E_a + \beta \sum_{i=1}^{n-1} h_j(i)$$

(4.6-11)

图4.6-13给出了 Cu_n^+ 和 Be_n^+ 的能级，其中，每个电子的束缚能由虚线箭头表示．可以看出，Cu_n^+ 离子簇的束缚能随强度振荡变化；而 Be_n^+ 束缚能随离子强度线性变化．

这些结果极为初步，远不能进行定量说明．同前几节的离子溅射过程和电离过程以及§4.7的中性化过程描述相比，离子簇的理论和实验研究相差很远，可以说是一个还未开拓的新领域．

§4.7 离子感生辐射和非辐射跃迁

表4.1-1已经指出了离子撞击固体表面所产生的各种效应．在发射过程中，除了前面说过的发射原子、离子、离子簇等外，还由于溅射粒子、轰击粒子(见§2.7)和基体(固体表面和本体)状态的变化发射电子和光子．本节简要说明这些发射过程以及由此发展起来分析表面特性的方法-离子中性化谱学、离子感生俄歇电子谱学以及离子产生辐射分析表面组分．

一 离子中性化谱学

首先考虑低能激态或电离原子打到固态表面上发生的电子跃迁过程．在图4.7-1的电子能量图中给出已经确定的主要过程，其中所给出的电子能量是在离子(或原子)同固体表面有一定距离．图4.7-1示出通过共振中性化到达中性化原子的一个激态能级，这个能级是在费米能级之下，一个电子由隧道从固体中的填满能

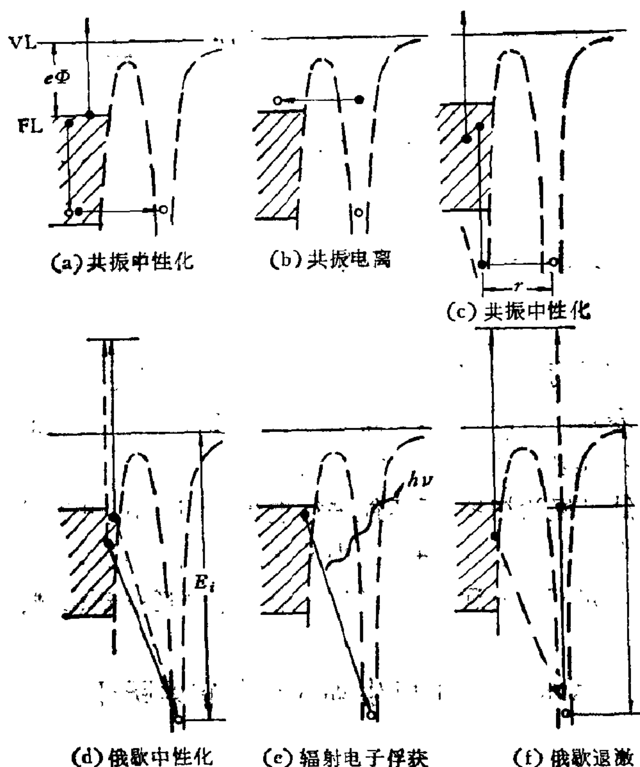


图 4.7-1 慢速运动离子或激态原子接近表面时可能的电子跃迁过程：(a)共振中性化(RN)；(b)共振电离(RI)；(c)芯能级的共振中性化；(d)俄歇中性化(AN)；(e)辐射电子俘获(REC)；(f)俄歇退激(AD)。VL-真空能级，FL-费米能级，$e\Phi$-功函数．箭头表示电子跃迁，圆点表示原子或固体中最初是填满电子的态，圆圈表示空穴态．俄歇中性化和俄歇退激中的虚线表示交换跃迁

级跑到相同能量的激态能级．如果是对着固体中的满带，发生中性化也会跃到基态．若剩下的空穴相对于真空能级(VL)的能量大于两倍功函数 $e\Phi$，那么带内的俄歇过程可导致电子发射．如果原子能级对着固体中未填满的能级，则接近表面的原子可经历共振电离过程，如图 4.7-1 (b)．图 4.7-1(c) 示出第三种共振过程，电子是从表面原子的芯能级放出的．于是，芯能级中留下的空穴可通过两个价带电子的俄歇过程衰变，并放出电子．

第二类过程中的第一步就涉及到二个俄歇电子的跃迁．在俄

歇中性化中，一个电子从固体的满带通过隧道跑到原子基态，所放出的能量正好为另一个价电子获取．如果价电子运动方向合适且离表面距离为 r 的离子基态复合能量 $E_i(r)$ 大于 $2e\Phi$，那么，这个价电子会放到真空中去[图 4.7-1(d)]．同这个过程相竞争的是辐射电子俘获[图 4.7-1(e)]，不过它的几率很小，以致俄歇中性化占绝对优势．辐射电子俘获过程也会发射可见光和紫外光[41]．如果激发能量 $E_m(r)$ 超过固体的功函数，入射到固体上的亚稳原子会通过俄歇退激来发射电子 [图 4.7-1(f)]．这个过程虽然像俄歇中性化那样有两个电子，但只涉及固体的一个电子．

哈格斯爵姆 (Hugstrum) 用三角图(图 4.7-2) 把单电子过程

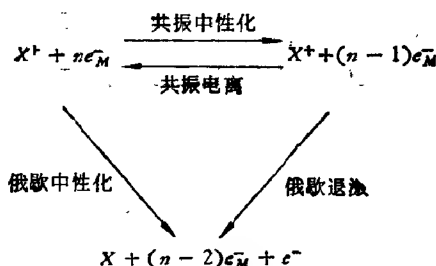


图 4.7-2　表明单电子过程和双电子过程相互联系的三角图

和双电子过程联系起来．当离子接近表面，原子的能级由于同表面相互作用而移动，在共振电离、俄歇中性化后或通过俄歇退激，发生共振中性化．系统达到终态的方式不同会影响能量分布和发射电子的产额图4.7-1所示的各个过程都涉及离子-表面系统的势能，而与离子的动能无关．这些过程产生电子发射叫做势电子发射．为了发展离子中性化谱学，需要进一步了解俄歇中性化和俄歇退激．

(1) 俄歇中性化和俄歇退激

图 4.7-3 给出一个慢速 He^+ 离子同钨相互作用中俄歇中性化的势能图．初态 $He^+ + ne_W^-$ 发展成象力相互作用所控制的大距离能量 -3.6 电子伏/r(Å)．接近表面时为屏蔽的库仑相互作用(斥力)，它依赖于对表面原子的碰撞参数和距离 r．终态 $He + e(n-$

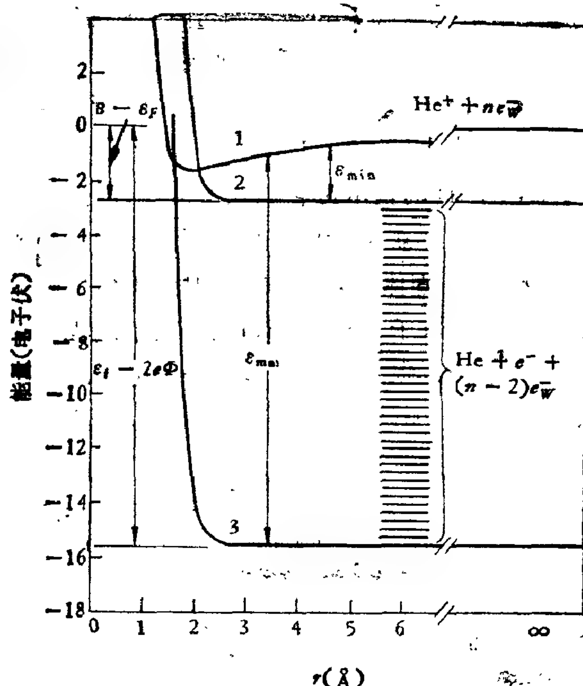


图 4.7-3 慢速 He^+ 离子同钨表面相互作用中俄歇中性化的势能图

$2)e_{\bar{W}}$ 形成宽度为 $2\varepsilon_F$ 的一个带，ε_F 是费米能量．由于碰撞是绝热的，图 4.7-3 中的跃迁均是垂直进行的．因此，曲线 1 和曲线 2—3 之间任一曲线的能量差应等于激态电子的动能．可用电子最大能量 $\varepsilon_{max}(r)$（曲线 1 和曲线 3 之间的距离）来定义有效电离能 $\varepsilon_i(r) = \varepsilon_{max}(r) + 2e\Phi$.

在离子碰撞过程中，当离子接近固体表面经过共振中性化到达激发能量为 $\varepsilon_{mi}(r) > e\Phi$ 的激态，就会发生俄歇退激过程．当距离 r 比较小使电离能 $\varepsilon_{mi}(r) < e\Phi$ 时，则会发生共振电离和俄歇中性化过程与此相竞争．图 4.7-2 已经显示出这些关联：共振中性化→俄歇退激和共振中性化→共振电离→俄歇中性化．图 4.7-4 绘出一个亚稳 Ne 原子入射到钨上俄歇退激的势能图．与图 4.7-3 中俄歇中性化情况不同的是，这里长程相互作用（即范德瓦尔斯引

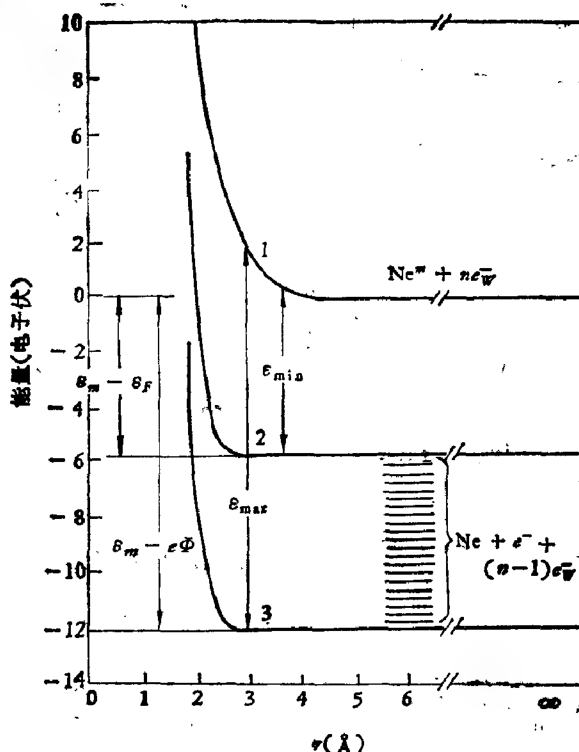


图 4.7-4 慢速的亚稳原子 Ne 同钨表面相互作用中俄歇退激的势能图

力)小到可以略去；由于亚稳原子 Ne^{m} 比 Ne 原子大，在比较大的距离处斥力就上升了．因此，初态曲线(曲线 1)和终态曲线(曲线 2 和 3 之间的任一曲线)就分开了，而且，ε_{max} 随着 r 的减少而增加．从俄歇中性化和共振中性化→俄歇退激中发射电子最大动能的不同观察到俄歇退激．

图 4.7-5 示出惰性气体离子轰击钼发射电子产额 Y_i 同入射粒子能量的关系[42]．可以看出，电子产额基本上是一个常数，在高能时略有增加，这是因为能量高时，释放电子所需要的能量可由入射粒子的动量来提供．同时，除了 Ne^+ 外，产额随离子基态中性化能量的增加而增加．Ne^+ 的行为特殊是因为出现另外的衰变道，即

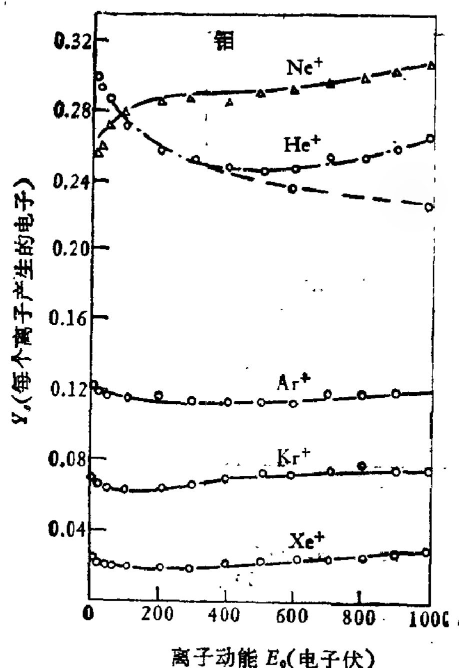


图 4.7-5 惰性气体离子垂直入射到清洁钼表面发射电子产额[43]

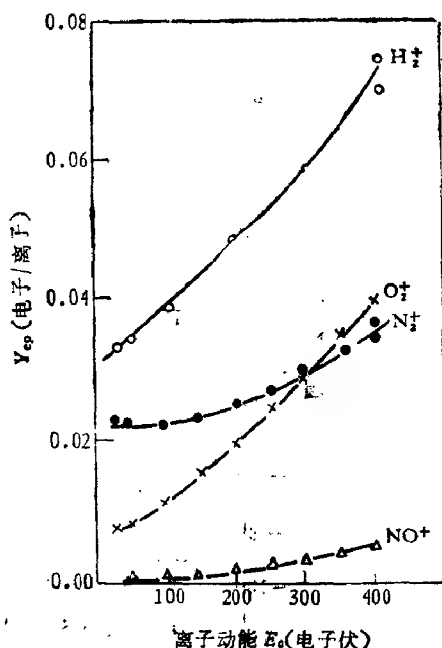


图 4.7-6 分子离子垂直入射到清洁钼表面的电子产额[43]

共振中性化→俄歇退激. 假定动能电子发射与入射粒子的电荷无关，势能发射电子产额 Y_{ep} 同入射粒子速度的关系可从相同种类但不同电荷离子的 Y_e 测量中推出. 这种方法得到的 Y_{ep} 在 $u \lessdot 5\times10^7$ 厘米/秒内随速度变化慢.

图 4.7-6 则是低能分子离子得到的电子发射产额，它们小于基态中性化能量类似的原子离子的电子产额，而且同入射粒子的能量关系更密切，其原因可能同分子中不同能级密度有关.

(2) 俄歇中性化跃迁几率

现在来考察发射电子的能量分布情况. 图 4.7-7 给出能量为 10 电子伏的几种惰性气体离子轰击钼表面时发射电子的能量分布曲线. 沿着能量轴的垂直线标出每个离子的 $\varepsilon_i(Y^+)-2e\Phi$

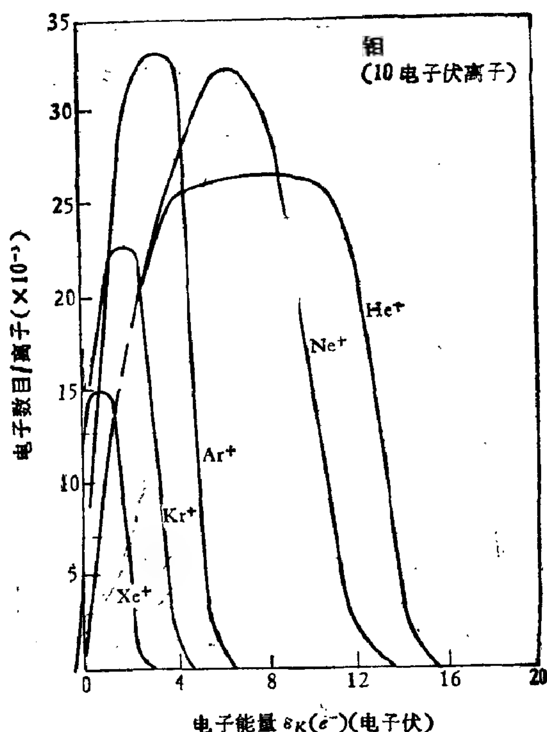


图 4.7-7　10 电子伏惰性气体离子垂直入射到清洁的钼表面发射电子的能量分布[42]

值。正如图 4.7-5 产额曲线所预言的那样，Ne^+ 轰击时发射电子能量分布曲线中动能最大值高，而且产额也高。这是因为共振中性化加上俄歇中性化产生较快的电子离开固体表面的贡献增加。图 4.7-8 为 5 电子伏 He^+ 离子入射到不同固态表面上发射电子的能量分布，可看出，其分布与被轰击表面的类型关系极大。

理论上怎样理解这些发射电子角分布的行为，早在 1927 年温泽尔(Wentzel)[43] 首先用一级微扰理论推出了俄歇效应的跃迁率

$$b_{ij} = (2\pi/h)\left|\left\langle\psi_j\left|\sum_{i\neq j}(e^2/r_{ij})\right|\psi_i\right\rangle\right|^2 N(\varepsilon_f) \qquad (4.7\text{-}1)$$

式中 ψ_j 和 ψ_i 分别为终态和初态的波函数，$N(\varepsilon_f)$ 为终态密度。电子之间的库仑相互作用发生跃迁。如果只有两个电子参加跃迁(其

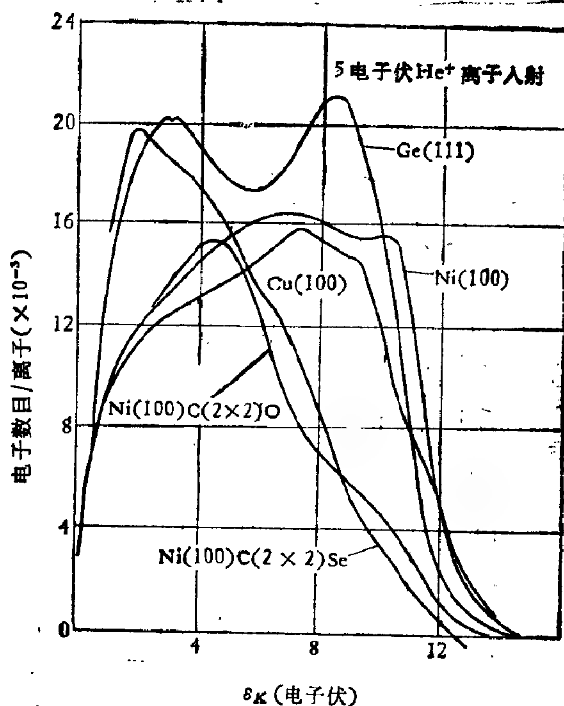


图 4.7-8 5 电子伏 He⁺ 离子垂直入射到不同类型固态表面所发射电子的能量分布[44]

它电子为旁观者)并且可以把波函数写成单电子轨道的乘积，于是跃迁矩阵元为

$$M_{if}=\iint \chi_f^*(r_1)\psi_f^*(r_2)\frac{e^2}{|r_1-r_2|}\chi_i(r_1)\psi_i(r_2)dr_1dr_2 \tag{4.7-2}$$

式中忽略了交换项.图 4.7-9 绘出相应的波函数. 在两个电子系统中，初态和终态的波函数必须是反对称的，即用 $\frac{1}{\sqrt{2}}[\chi(r_1)\psi_i(r_2)-\chi_i(r_2)\psi_i(r_1)]$ 来代替 $\chi_i(r_1)\psi_i(r_2)$. 而且认为在图 4.7-9 中 1 和 2 跃迁会发射相同能量的电子，但在实验上不能区分.

为了方便起见，把矩阵元写成与能量、角度和空间坐标相关的形式并重新排列，把单电子坐标放到库仑微扰项一边来，则有

$$M_{if} = \iint \chi_f^*(r_1)\chi_i(r_1)\frac{e^2}{|r_1 - r_2|}\phi_f^*(r_2)\phi_i(r_2)dr_1dr_2$$

(4.7-3)

这样，跃迁矩阵元可以看成两个电荷云 $F(r_1) = \chi_f^*(r_1)\chi_i(r_1)$ 和 $G(r_2) = \phi_f^*(r_2)\phi_i(r_2)$ 之间库仑相互作用积分。由于原子波函数 $\chi_f^*(r_1)$ 的局域特征，$F(r_1)$ 是靠近离子位置的局域函数，而且，库仑相互作用在固体内部受价电子所屏蔽。因此，我们得出俄歇中性化主要取于固体表面外的电子密度。$\chi_i(r_1)$ 在表面外拖的"尾巴"愈长，同 $\chi_f^*(r_1)$ 重叠的愈多，矩阵元也愈大。结果有：

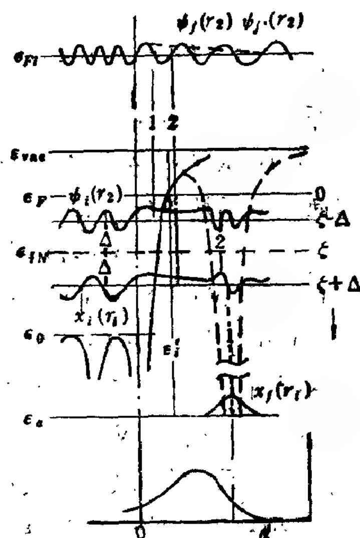


图 4.7-9 俄歇中性化过程跃迁的电子能级和相应波函数示意图

(i) M_{if} 随 χ_i 和 ϕ_i 对称特性从 $s \to p \to d$ (相同能量)的变化而减小。

(ii) M_{if} 随带中电子能量 ε 的增加(因 ζ 减小，图 4.7-9)而增加。

(iii) 波矢 **k** 垂直于表面的，初态的 M_{if} 也大。

(iv) 从 (4.7-3) 式看出库仑相互作用对小动量转移有利，波矢 **k** 垂直于表面的终态 ϕ_f 的 M_{if} 也大。

将 (4.7-3) 式对所有初态和终态积分就可得到总跃迁率同离子-表面距离 r 的关系，

$$R_T(r) = \iiint (2\pi/h)M_{if}^2N_c(\varepsilon_k)N_v(\varepsilon_i)N_v(\varepsilon_f)d\varepsilon_id\varepsilon_fd\varepsilon_k$$

(4.7-4)

上式忽略交换项及初态-终态之间的相互作用的影响，$N_v(\varepsilon)$是价带中的态密度。

令 $P_T(r, v_0)dr$ 为初速度 v_0 离子在距离 r 处 dr 内被中性化的几率，$P_0(r, v_0)$ 是该离子未经俄歇中性化到达 r 的几率。那么

$$P_T(r, v_0)dr = \frac{1}{v_0} R_T(r) P_0(r, v_0) dr \tag{4.7-5}$$

和

$$P_0(r, v_0) = \exp\left(-\int_r^\infty \frac{R_T(r)dr}{v_0}\right) \tag{4.7-6}$$

要得到发射电子的能量分布 $N_0(\varepsilon_k)$，特作如下简化：

(i) 从 $R_T(r)$ 分出角关联的因子，然后把角关联因子并入电子逃逸几率函数 $P_e(\varepsilon_k)$ 中得

$$N_0(\varepsilon_k) \doteq P_e(\varepsilon_k) N_i(\varepsilon_k) \tag{4.7-7}$$

其 $N_i(\varepsilon_k)$ 和 $N_0(\varepsilon_u)$ 分别为固体内和外的电子能量分布。

(ii) 由于函数 $P_T(r)$ 在 r_m 处最可几值有峰值特征，R_T 同 r 的关系可用 $R_T(r_m)$ 同能量展宽函数的卷积来处理。

(iii) 终态密度 $N(\varepsilon_f)$ 可取为常数。

(iv) 跃迁矩阵元(包括交换)可以分成向上电子 (f) 和向下电子 (i) 的项，并同态密度 $N_v(\varepsilon_f)$ 和 $N_r(\varepsilon_i)$ 组合得到函数 $C(\varepsilon_f)$ 和 $B(\varepsilon_i)$。从这个假定就可看出内激态电子的能量分布 $N_i(\varepsilon_k)$ 正比于卷积。

$$F(\zeta) = B^*C = \begin{cases} F_1(\zeta) = \int_{-\zeta}^{\zeta} B(\zeta+\Delta)C(\zeta-\Delta)d\Delta \\ \qquad 0 \leqslant \zeta \leqslant \zeta_f/2 \end{cases} \tag{4.7-8}$$

$$\begin{cases} F_2(\zeta) = \int_{\zeta-\zeta_F}^{\zeta_F-\zeta} B(\zeta+\Delta)C(\zeta \\ \qquad -\Delta)d\Delta \quad \zeta_f/2 \leqslant \zeta \leqslant \zeta_f \end{cases} \tag{4.7-8a}$$

其中 ζ 是带能量，其值为

$$\zeta = \frac{1}{2}(\varepsilon_i - 2e\Phi - \varepsilon_k) \tag{4.7-9}$$

式中终态能级的能量 ε_k 是自真空能级测得的。

(V)方程(4.7-8)和(4.7-8a)可以写成自卷积 (selfconvolution)

的形式

$$F(\zeta)=D^*D=\begin{cases}F_1(\zeta)=\int_{-\zeta}^{\zeta}D(\zeta+\Delta)D(\zeta-\Delta)d\Delta \\ \qquad 0\leqslant\zeta\leqslant\zeta_f/2 & (4.7\text{-}10)\\ F_2(\zeta)=\int_{\zeta-\zeta_F}^{\zeta_F-\zeta}D(\zeta+\Delta)D(\zeta-\Delta)d\Delta \\ \qquad \zeta_f/2\leqslant\zeta\leqslant\zeta_f & (4.7\text{-}10a)\end{cases}$$

$D(\zeta)$ 可解释为平均初态跃迁密度。

(3) 离子中性化谱学方法

方程 (4.7—10) 的卷积给我们提供了固态表面上和表面外态密度的某种平均 $D(\zeta)$。这种态密度因离子存在而改变并为能量展宽函数和能量有关的跃迁矩阵元所权重。由于穿过一给定对称态的带的变化是光滑的，所以函数 $D(\zeta)$ 很有用的。因此，在大多数情况下跃迁密度函数 $D(\zeta)$ 的结构应同初态密度 $N_s(\zeta)$ 中的类似结构密切相关。获得 $D(\zeta)$ 的方法有：

(i) 用低能离子(<20 电子伏)入射测量能量分布曲线 $N_i(\varepsilon_k)$。

(ii) 将入射粒子运动引起的能量展宽重叠合，以得到"无展宽"的分布 $N_0(\varepsilon_k)$。

(iii) 用激态电子通过表面位垒逃出的几率 $P_e(\varepsilon_k)$ 除以 $N_0(\varepsilon_k)$ 来得到分布 $N_i(\varepsilon)\propto F(\varepsilon_k)$，并从方程 (4.7-9) 得到分布 $F(\zeta)$。逃逸函数 $P_e(\varepsilon_k)$ 预先不知道，但可以推出一个参数化的形式，然后调节这些参数使 He^+ 所得到的终态 $F(\zeta)$ 与 Ne^+ 离子得到的符合(但 $N_0(\varepsilon_k)$ 却不同)。

(iv) 把 $F(\zeta)$ 重叠合以得到 $D(\zeta)$，这是一个难以处理的数学问题。其困难程度和方程 (4.7-10) 的适用性可参考文献 [46]。

实验的某些要求比较高，妨碍了这种研究固体表面电子性质非常有用的方法的广泛应用。第一个要求是要有很低能量 (<20 电子伏) 的离子束以减小动能展宽和电子能量分布曲线中共振中性化和共振电离过程的混杂。入射束流在离子种类、电荷和激发态等方面应很纯，否则组合能量 ε_i' 的展宽会影响发射电子的能量

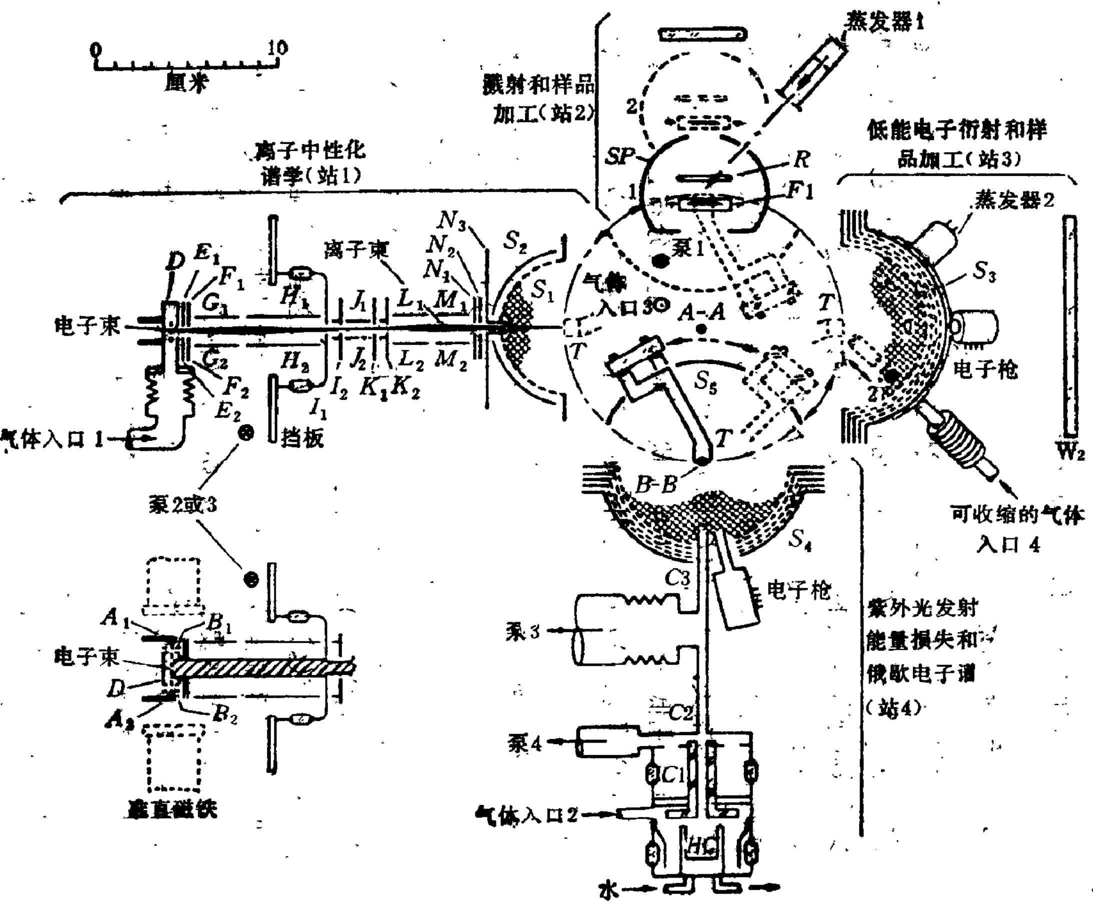


图 4.7-10　离子中性化谱学及有关的多功能实验装置示意图[44] 中心靶室通过绕 A-A 轴转动到达任一个实验站的入口，而入射角的调整是通过绕 B-B 轴转动进行的。站 1 进行离子中性化谱学实验，站 2 是溅射和样品加工，站 3 和站 4 分别用于低能电子衍射和俄歇电子谱学.

图中 A-A：整个靶装置转动轴；B-B：使入射角改变的转动轴；T：靶；S_1，S_2，S_3，S_4，S_5：球形电子收集器；N_1，N_2，N_3：鞍形场透镜；M_1，M_2，L_1，L_2，H_1，H_2，G_1，G_2：静电聚焦透镜；J_1，J_2，I_1，I_2：偏转板；K_1，K_2，F_1，F_2，E_1，E_2，D，A_1，A_2，B_1，B_2：电极；SP：溅射室；R：引出极；$F1$：溅射托架；C_1：水冷却石英管；C_2，C_3：细管；HC：空心钼阴极

分布曲线。束流的纯度可用质量选择器和控制离子源电子的能量来实现。现在已经可以产生质量分析过的低能离子束了。图 4.7-10 是进行离子中性化谱学（INS）的实验装置[44]。

除了入射束装置外，就是要分析发射电子的能量。通常用磁屏蔽球形或半球形收集器，以及采用延缓势和模拟或数字微分法进行的.利用能量色散静电分析器的优点是可得到较高的信号-噪声比且可利用电子倍增器进行放大。由于发射电子角分布在垂直表面的方向上有一个峰，故最好在表面垂直方向放一个球扇形分析器。入射离子从掠角的方向射入固体表面。后者降低了对很低能量离子束的要求，因为在离子中性化谱学中要尽量减小的是离子"横向"能量 $E_{0\perp} = E_0\cos^2\theta$。另外，利用斜入射也较易控制束流的角分散，而它对于维持"横向"能量分散小是重要的。此外，还要超高真空条件，10^{-10} 托.

(4) 应用事例

图 4.7-11 是离子中性化谱学 (INS) 应用于单晶 Ni. $D(\zeta)$ 函数的结果同紫外光电子谱学 (UPS) 的数据 $L(\zeta)$ 进行了比较：(i) 后者非弹性散射电子的尾巴比前者长，其原因是 UPS 同时还取样

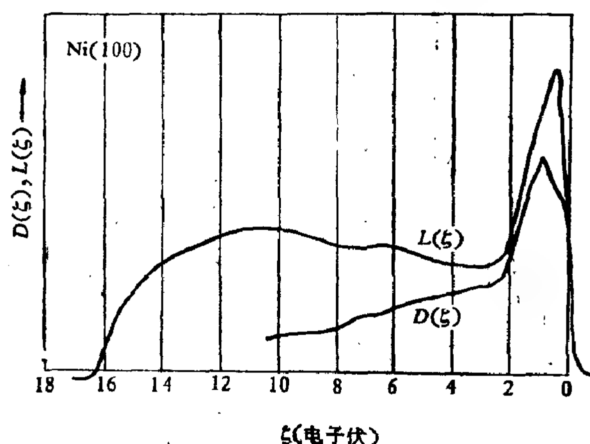


图 4.7-11　INS 跃迁密度函数 $D(\xi)$ 和紫外光电子谱的 $L(\xi)$ 比较 [Ni 晶 (100) 表面]

于金属内部；(ii) 在 INS 中的 $3d$ 电子峰值比较低是因为这些轨道的局域特征，使得它们隧道几率小于 s 和 d 电子。这种数据表明表面 d-带密度的均方宽度小于本体的值，这是因为表面上原子的配位数减小。

图 4.7-12 为清洁和表面覆盖汞的 Si(111)7×7 表面的离子中性化谱的结果。利用两个不同能量的 He^+（10电子伏和 20 电子伏），可以确定固体外电子密度怎样衰变，因为，平均说来，具有不同能量的离子会从离表面不同的距离取样固体。因此，图 4.7-12 给出局部态密度 Hg-d-分量的衰变比 Si-p 分量的衰变快。已经估计出，平均起来 20 电子伏离子比 10 电子伏离子更靠近表面 ~0.1 Å 处中性化。在所有研究表面电子结构的电子谱学中，离子中性

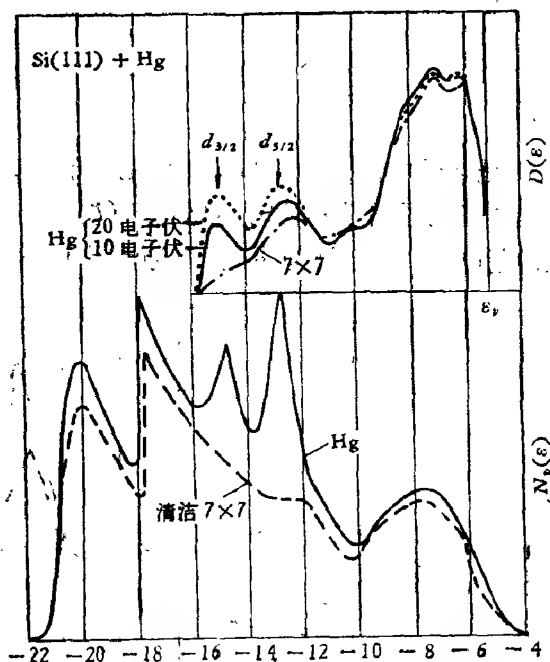


图 4.7-12 上图：10 和 20 电子伏 He^+ 离子入射 Hg 覆盖 Si(111) 面上 INS 跃迁函数 $D(\varepsilon)$ 以及 10 电子伏 He^+ 入射到清洁 Si(111)7×7 表面上

下图：清洁和 Hg 覆盖 Si(111)7×7 表面的紫外光电谱 $N_p(\varepsilon)$[47]

化谱学（INS）是探测固体表面外波函数变化的唯一方法。

INS 最主要优点是对表面电子结构特别灵敏。若同紫外光电子谱学（UPS）等结合起来，可确定电子轨道怎样从表面向本体变化。同时，研究表面电子过程无疑会使我们更有效地利用二次离子质谱和低能离子散射谱学。

二 离子感生俄歇电子谱学（IAES）

(1) 电子感生俄歇电子谱（EAES）的基础

电子轰击产生俄歇电子谱（AES）是固体表面组分分析的有效工具。通常电子束的能量范围 1—3 千电子伏激发固体中内壳层电子(芯电子)。这个空位(或芯空穴)主要由双电子俄歇过程退激，即是，从较高电子能态的电子填到空穴并把能量传给第二个电子-俄歇电子，这个俄歇电子发射出固体外而被观察到，并且具有特征能量。这个特征能量主要是能级分裂程度的函数，可以用来确定激态原子。这个俄歇效应类似于前述的俄歇中性化（AN），但也有重要的区别：(i) 在 AES 中跃迁过程是同一原子内的空穴和电子，也即是说，常是原子内部的事情，而在 AN 中跃迁常常发生在原子之间，因为入射离子具有空穴和固体提供电子；(ii) 在 AES 中激态电子常产生于固体内几层深处，而 INS 中的电子是从表面区域发射的。所以，INS 是“真正”表面分析的工具，而 AES 是提供接近表面内部的信息。

俄歇跃迁通常用三个字母 WXY 来标记，W 表示空穴，XY 表示参加的电子。当然完整的描述需要定义终态的自旋、轨道和总角动量。大多数 EAES 的应用是测量 WXY 跃迁能量来确定元素。相对于费米能级的俄歇电子能量可由下式估计出

$$\varepsilon_{WXY}(Z) = \varepsilon_W(Z) - \frac{1}{2}[\varepsilon_X(Z) + \varepsilon_X(Z+1)] - \frac{1}{2}[\varepsilon_Y(Z) + \varepsilon_Y(Z+1)] \quad (4.7\text{-}11)$$

式中 $\varepsilon_i(Z)$ 是原子第 i 轨道的电子能量（相对于费米能级）和

$\varepsilon_i(Z+1)$ 是下一个较重元素 $(Z+1)$ 相应的量. 这个公式考虑到交换以及由核电荷屏蔽较弱（芯空穴的作用）所引起外壳电子束缚的增加. 实际上，EAES 中常常是根据已知组分的"标准"谱来对照. 俄歇峰的宽度是受所有能级宽度卷积所控制. 如果忽略电子和热振动展宽及多体效应，能级宽度 Γ 同能级寿命的关系是 $\Gamma=\frac{\hbar}{\tau}$. 涉及价带跃迁则由于能级分布穿过整个带而变得很宽. 如果用 ζ_0 表示X射线发射谱学测得这个带的宽度（因此它包括芯空穴效应和带中俄歇展宽），那么包括两个芯能级 C_1、C_2 和价带 $V(C_1C_2V)$ 的跃迁会产生峰宽为 ζ_0 的俄歇电子，而CVV 的跃迁具有宽度 $2\zeta_0$. 因此，固体的俄歇峰，特别是那些含有价带电子的俄歇峰会比自由原子的俄歇峰宽.

仔细考察俄歇谱可进一步鉴定元素. 例如，当表面形成化合物时，由于"外壳屏蔽"的变化使价态发生变化，引起俄歇谱的能量位移（"化学位移"），这可用于化学分析. 当然比 X 射线光电子谱学（PES）分析起来要复杂，因为这里涉及到三个能级. C_1C_2V 和 CVV 跃迁中俄歇谱的形状也反映着价带态密度的变化，所以这些谱形也用于确定化学元素和化合物.

同离子感生中性化谱学（INS）的情况相似，CVV 俄歇谱代表跃迁密度 $D'(\zeta)$ 的自卷积，但在电子感生俄歇电子谱（EAES）情况下有非弹性散射电子造成大的本底. 为了得到跃迁密度必须找到一个方式除去这个本底. 这是一个很困难的问题. 而且，$D'(\zeta)$ 对态密度并不是很好的近似，其原因主要是矩阵元效应，也可能与多体边缘异常效应有关. 但是，最近理论发展[49]将使 AES 对固体中原子局部环境提供更有价值的信息.

(2) 离子感生内壳层激发

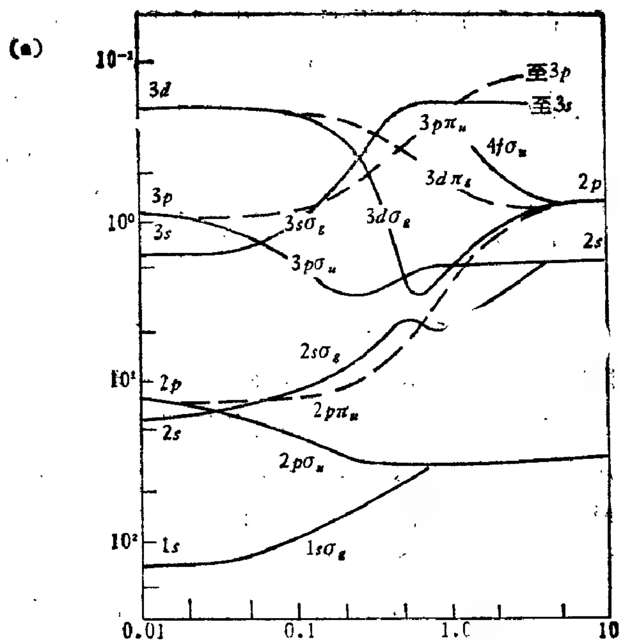
在离子碰撞内壳层激发中必须区别两种极限情况：碰撞期间内壳电子弱扰动和强扰动. 弱扰动的经典例子是速度 v 比芯电子高的质子和 α 粒子产生的扰动. 基本机理是入射粒子和靶电子之

间的相互作用(见§2.7)，可用平面波玻恩近似或两体碰撞近似来描述(参看§2.4和§2.3)，碰撞截面正比于入射离子电荷 Z_1 的平方. 在低速下，还必须考虑远距离碰撞时内壳层轨道的极化、绝热参数 $v\hbar/\varepsilon_c$ 小于电子轨道半径（ε_c 是没有扰动的电子束缚能）时芯电子束缚能的增加，以及由于原子核间斥力和非弹性能量损失[见(2.3-34)式]使入射粒子在空间的速度发生变化等附加因素.

如果轻离子速度再低，或者入射粒子是重离子，弱微扰处理就不行了，而要用与电子无关的分子轨道来描述碰撞系统，这是在碰撞期间暂时形成的"准分子". 在速度很低的极限情形下，电子可绝热调节以适应原子核位置的变化，可用玻恩-俄喷汉木近似来描述分子轨道（MO），其中忽略了电子和原子核运动之间的耦合. 然而，在许多碰撞中应包括耦合项，这种耦合在核间分开的某些区域是大的，例如对称性相同分子轨道的交叉：利用所谓"非绝热"分子轨道可以实现这种交叉，它们是绝热分子轨道的叠加而且包括重要的耦合项，也即是说，允许能级之间交叉.

图4.7-13给出 Ne-Ne 和 Ne-O 碰撞的哈特里-福克（Hartree-Fock）计算所得到非绝热分子轨道能级图. 无需从头进行计算，而由能级关联图就可说明原子分开(SA)时的能级怎样同核间没有分开而是统一的原子（UA）的能级相连接. 描绘能级非绝热关联图的规则是：(i) 若 SA 和 UA 在其波函数中有相同数目的波节 $n-l-1$，那么它们的能级是彼此相关联的，也即是，这个波节数是守恒的(这里 n 为主量子数，l 为轨道角动量)；(ii) 轨道角动量在核间轴上的投影 λ 也是好量子数并守恒；因此，轨道角动量 l 的原子能级产生 $\lambda = 0, 1, \cdots\cdots l(\sigma, \pi,$ 等）的分子轨道（MO)；(iii)然后，从 K 壳层（$1s\sigma$MO）开始逐渐到价壳层，把对称性相同的态连结起来，注意总是要它连到束缚更紧的原子能级上.

分子轨道（MO）模型的结果是电子的促进作用，使得从 SA 变到 UA 时某些分子轨道的主量子数增加. 一种可能的解释是泡利原理的结果，因为UA的 nl 能级没有空位可以容纳下 SA 情形时



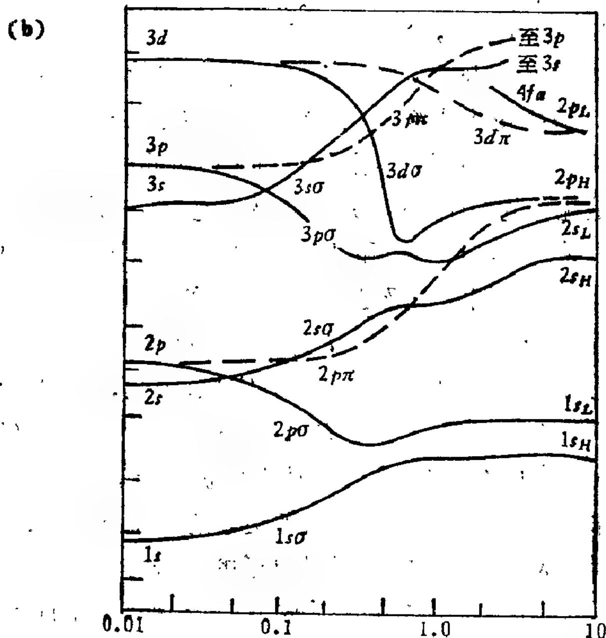


图 4.7-13 非绝热分子轨道(MO)能级图：(a) Ne + Ne[503]；(b) Ne + O[503]

两个原子全部 nl 能级。但这还不能解释为什么有些能级长的特别快，例如图 4.7-13 中的 $2p$ 能级，两个碰撞粒子的原子数并没有什么特别不同的地方。粗略地看，碰撞期间有两个相竞争的效应发生。一方面，电子的势能随着两个原子接近变成 UA 时核电荷的增加而增加。另一方面，两个原子的电子云随着核间距离的减少相互作用加强了，这就减少了电子的束缚能；电子在子壳层上数目愈多，电子斥力愈大。这就解释了为什么 d 电子比 p 电子被促进的多，而它们又都比 s 电子促的多。还可以解释电子能量在核间距离为相互作用子壳层最大电荷密度半径之和的数量级时开始下降很快。

电子促进模型是解释原子碰撞中入射粒子速度远低于内壳层电子速度时内壳层激发的基础。涉及核间距离随时间变化的耦合叫做径向耦合，可引起对称性相同态交叉处的跃迁，条件是终态未被占满（图 4.7-13 中的 $3d\sigma-3s\sigma$）。而且，当两个原子核最接近时核间轴的快速转动会由转动耦合而发生跃迁，这种耦合连接了 $\Delta\lambda=1$ 的态（例如，若两原子接近时在 $2p\pi$ 轨道上有一个空态，就可能发生 $2p\sigma\rightarrow 2p\pi$ 的跃迁，如图 4.7-13 所示）。也有其它许多可能的跃迁发生。因此，由于组构相互作用引起外壳电子的独立粒子模型的描述遭到破坏，才使双电子跃迁有可能发生；在高速下，外壳层中会形成空穴，从而打开了原先是满壳层之间跃迁的可能性；如果空穴靠得很近，既使在能级没有交叉的情况下，空穴也可通过空位共享在不同的分子轨道之间转移。这些过程发生的几率依赖于碰撞粒子的类型和其相对运动的速度。关于重离子引起内壳层电离的详细论述可参考文献[52]。

当靶原子是在固态中，会发生某些特殊的效应。[53]重离子以低速穿进固体，在许多情况下它们的外层电子能级会浸在固体的价带中，因而被展宽。外壳层激发淬灭很快，在金属中其退激的时间约为10^{-16}秒数量级，这是价带电子快速屏蔽响应所致。因此，原子在固体中衰变产生俄歇谱及其以比费米速度小的速度运动特点均同固体中处在静止状态的原子相同。但是，如果激态原子被溅射并受固体表面影响在固体外衰变，它会发射表征自由原子特性的

俄歇电子。还有一个固态效应与双碰撞可能性有关。如果一个内壳层空穴的寿命等于或长于碰撞之间的时间，原来是激态原子可把其空位转移给静止原子，也可产生新的激发，这在两个自由原子之间的碰撞是不可能发生的。其外，也有相当一部分内壳激发来自于反冲原子的碰撞。

(3) IAEA 的实验技术

在离子感生俄歇电子谱学中，也必须注意离子束的质量分析和单能。特别是在低能(低于 10 千电子伏) 下工作，内壳电离随离子能量上升很快，并且与入射粒子的类型关系很大。做不到这些，实验数据很难重复。

真空度的要求与 IAES 应用有关。IAES 有时可用作真空度的检测装置。由于常常感兴趣的是接近表面的组分，因此要求超高真空的测量。

仪器设备的核心是电子谱仪。常用的有三种基本类型。一种是半球形延缓势分析仪 (RPA)，类似于离子中性化谱学中所用的，示于图 4.7-10，其优点是用它可同时进行低能电子衍射的研究，但是能量分辨率只有 ~1%，信号-噪声比也较低。另外两种类型是反射式，圆筒镜 (CMA) 和 180° 球扇形(HSA)分析器。图 4.7-14 给出圆筒镜分析器示意图。它应用很广，主要优点是效率高，几乎整个方位角 2π 均可接收电子。内圆筒和外圆筒加有电位

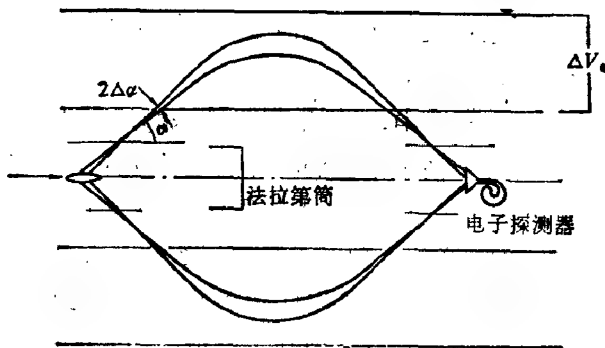


图 4.7-14 圆筒镜形分析器示意图

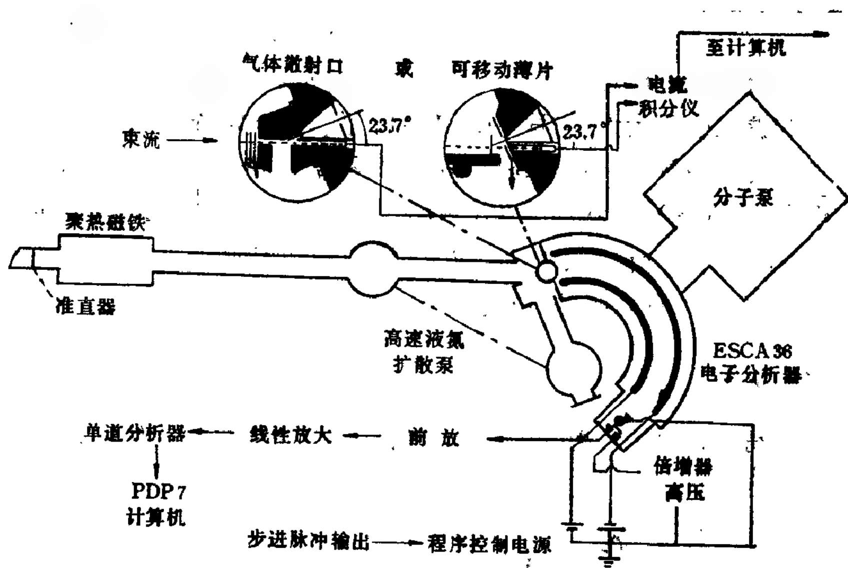


图 4.7-15 球扇形分析器装置示意图

差，使电子聚焦到探测器上。在需要高透射率和高照度而不考虑分辨率时，用 CMA 合适．况且建造容易．而球扇形分析器(HSA)则复杂得多．不过它同普通球形分析器区别就是电极绕着 ϕ 角．其能量分辨率 $\frac{\Delta\varepsilon}{\varepsilon}=0.0002$，而且聚焦容易也很适合配置多探测器系统，大大地增加数据获取能力．图 4.7-15 是约翰逊（Johnson）[54]等人用于束箔俄歇测量的装置，$\theta_L=23.7°$．一般来说，球扇形分析器适用于一个观察角度（θ_L 通常为 90°）的纯谱学测量，因为这时需要高灵敏度和高效率．而且不需要予延缓透镜或其复杂的电子光学系统．

由于俄歇谱是叠加在大而平滑的电子本底上，多数情况首先测量能量分布 $N(\varepsilon)$ 的微商较为方便．这可用小的正弦电压调制能量分析器来实现．

对于通常运行模式的反射式分析器，信号由

$$S(\varepsilon)\propto\varepsilon N(\varepsilon) \tag{4.7-12}$$

给出，第一个谐振信号是

$$H(\varepsilon) \propto N(\varepsilon) + \varepsilon N'(\varepsilon) \tag{4.7-13}$$

就可给出接近理想的结果，$N(\varepsilon)$ 可取为常数。如果信号太低，需用的调正电压太大[方程(4.7-12)]，谱会出现畸变。常常测量信号强度是用微分信号中峰对峰高度(略写为 pph)。必须小心的是俄歇峰 $N(\varepsilon)$ 形状的变化(例如，化学状态的改变)，这些往往是 $N'(\varepsilon)$ 的 pph 改变，而 $N(\varepsilon)$ 峰面积却不变。如果调制电压不够小，会影响俄歇峰的 pph。

(4) 实例

高能轻离子入射的俄歇电子谱探测金属的结构。例如，用束

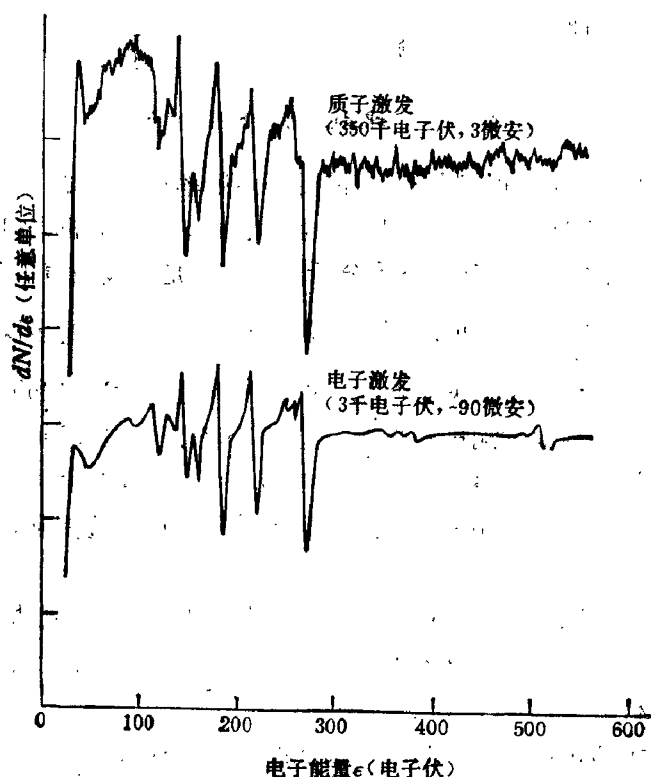


图 4.7-16　质子和电子在钼表面激发的俄歇谱．质子激发谱的噪声大主要是由于束流不稳定造成的

流3微安、350千电子伏H^+和CMA分析钼和不锈钢的IAES，探测到低能Mo、S、Fe和C的俄歇峰，但却没有氧的峰。图4.7-16

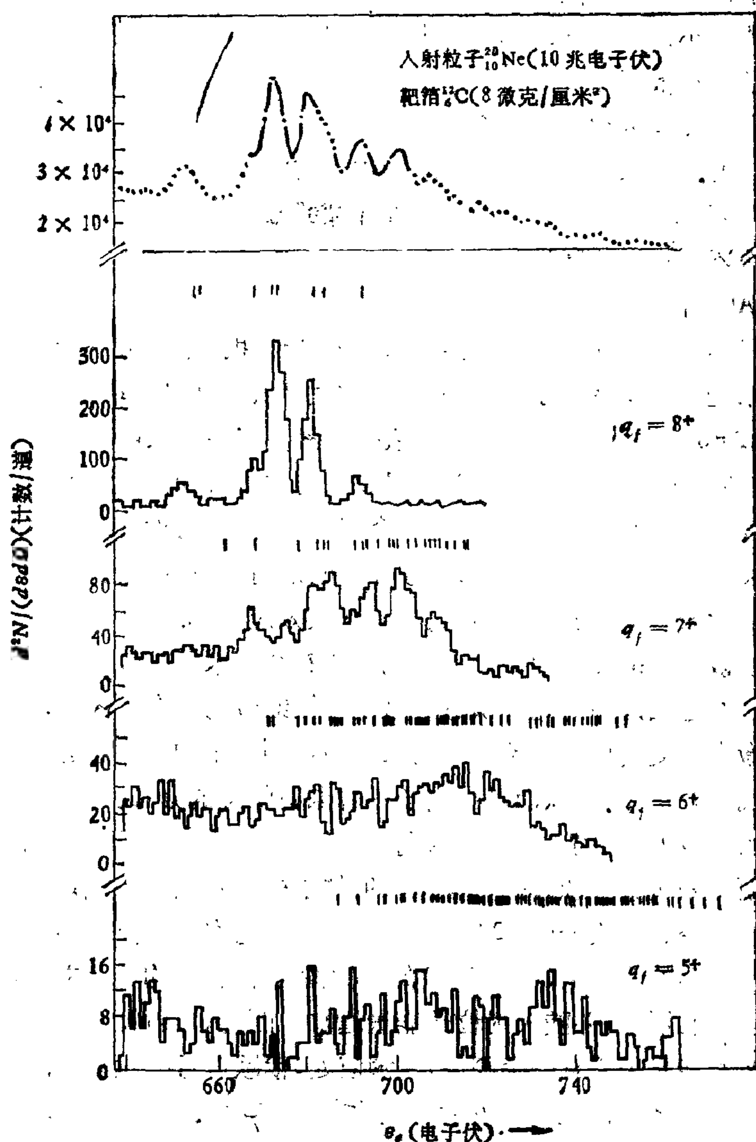


图4.7-17 箔片激发Ne入射离子的俄歇电子谱.[55]
上图没有符合，下图有符合的结果，电荷终态分别为5+–8+

是铝样品上得到的 EAES 和 IAES 谱的比较．用快速质子作 IAES 比 EAES 好，因为前者情况下，内壳电离的深度分布几乎同靶原子的深度分布相同，在这个深度范围快速质子的能量损失和角偏转均很小；而 EAES 中的初电子能量和角度分散都很大，并且由电子的背散射而产生二次电离．另外，快质子引起的次级效应小，仔细测量俄歇信号的绝对强度可以得到电子在固体中精确的衰减长度．如果利用高能重离子来进行材料分析，其产生截面会更高，还可对特定杂质元素进行选择性的激发，不过，这方面的实验工作还未真正开展．

IAES 同卢瑟福背散射（§ 3.1—§ 3.3）、离子感生 X 射线发射（§ 3.6）和核反应分析（§3.7）结合起来发挥作用．这些方法所用的离子束能量为 2 兆电子伏左右． 若采用 2 兆电子伏 H^+ 作入射束，IAES 可分析任何质量大于氢的元素，其杂质浓度只要达到 0.1%．对于轻元素的杂质，RBS 和 PIXE 方法很难探测．IAES 则给出接近样品表面组分的信息，是一个很好的补充．虽然有时在样品室上装有电子枪来进行 EAES 分析，但是用快速质子进行 IAES 分析则比较容易得到定量结果，因为次级效应很小．

在俄歇束箔测量中，近来人们采用符合技术确定较高能量入射粒子穿过箔片后的电荷状态，这是比较细致的工作，图 4.7-17 是双激态衰变发射的俄歇电子与束流中各种离子的电荷态之间的符合测量及单谱．[59]从而给出离子各种电荷状态的分布．

大多数 IAES 的工作是入射离子能量低于 100 千电子伏以下．早期研究是观察俄歇产生过程．入射粒子的俄歇发射主要是背散射后在真空中的衰变（图 2.7-7 和图 2.7-9）．它类似于离子通过箔片所观察到的俄歇谱（图 4.7-17 的上谱图）．俄歇峰的宽度主要是由于多普勒展宽，并随入射粒子能量增加．而且，入射粒子的俄歇信号与其能量关系有一个阈值，在阈值处，俄歇信号陡然加大．

更为重要的是靶原子发射的俄歇电子的研究．实验上出现了几个问题：(i) 俄歇电子是从入射粒子和靶原子之间碰撞（P-T）产生的，还是快速反冲原子与静止靶原子碰撞（T-T）产生的？

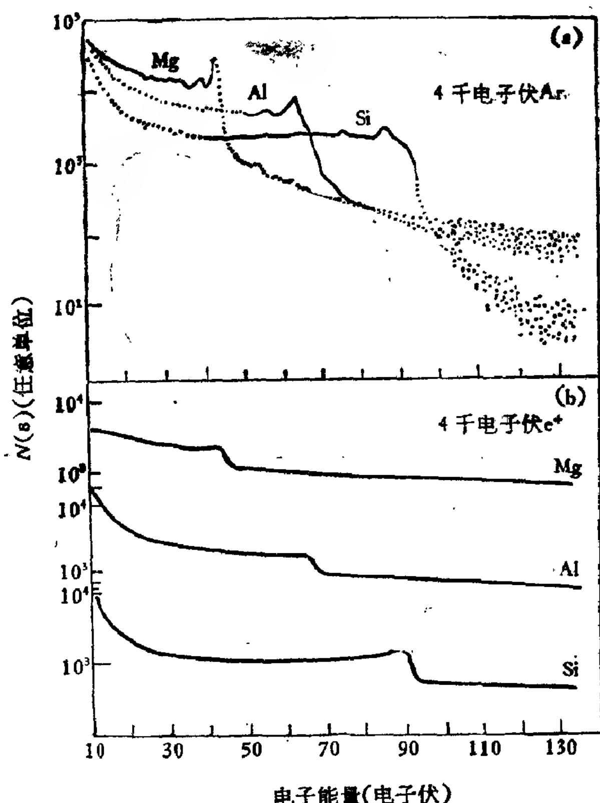


图 4.7-18　4千电子伏离子（a）和4千电子伏电子轰击 Mg, Al 和 Si 的俄歇谱(入射方向为 45°)(b)[42]

(ii) 俄歇谱中窄的“准原子”峰(图 4.7-18) 是与本体中运动原子有关，还是同已经溅射出原子(在自由空间)有关？(iii) 比主峰能量低的区域出现的侍从峰的来源是什么？

第一个问题一般不好回答，因为它依赖于入射粒子和靶的组合. 对重入射粒子，低能下 T-T 碰撞是主要的. 但在低能轻离子入射时，俄歇电子主要由 P-T 碰撞产生的. 实验证实如果 T-T 碰撞是主要的，产额正比于元素浓度的平方. 样品表面吸附氧时 Ar^{+} 激发 Al-L 和 Mg-L 俄歇电子信号极大地减弱，也证明重入射粒子中 T-T 碰撞是主要的。

轻金属靶在离子轰击下的俄歇谱是在一宽的结构上叠加着一些窄尖峰。前者是属于固体内俄歇衰变，同电子激发的情况类似。窄尖峰的来源至今说法不一，通常认为是由于溅射的激态原子在固体外衰变。也有人主张[56]这些尖峰是固体内快速运动的反冲原子发射的，这些反冲原子在运动时其价电子从固体的价带中“退耦”，变成“准原子”。但是，这个模型同理论预言相矛盾。由于在这些能量下，反冲原子运动的速度比费米速度低得多，它们的行为应系静止的原子。窄俄歇峰起源于溅射原子的结论是从峰的多普勒展宽测量中得到的。图 4.7-19 是实验结果，Ar^+ 离子入射方向是 45°，而观察方向与表面垂直，看出展宽随着离子能量增加向电子能量高的方向偏移，表明发射原子以观察方向的速度分量运动，而不是相反(例如反冲原子运动方向)。

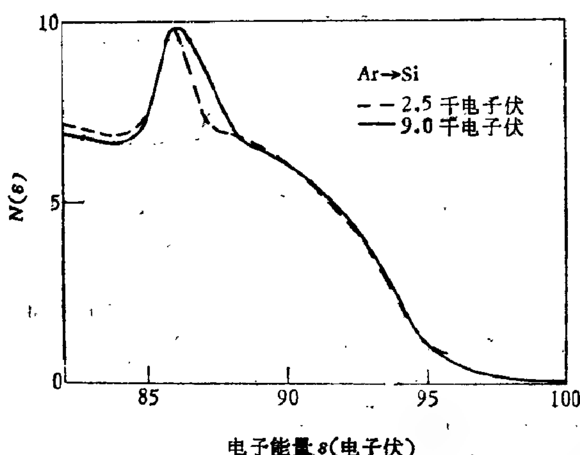


图 4.7-19　2.5 千电子伏和 9 千电子伏 Ar^+ 离子以 45°入射到 Si 上激发俄歇谱。[57]曲线是归一化的

除了主要的窄尖峰外，在电子能量较低的区域还有一些侍从峰，最初认为它们是属于表面等离子体激元的损失。比较合理的解释还是与上述窄峰的形成相一致，即仍与溅射原子有关，认为其较外层电子也能参与俄歇过程。因此，在 Mg、Al 和 Si 情形下，人们可以根据外壳层不同的态确定为 LM_1^2、LM_1M_2、和 LM_2^2 的

跃迁.计算的俄歇能量同实验符合很好,[57]但还不可能确定出射粒子特定电荷态的所有能级.

用低能离子 IAES 作分析的可能性至今还未很好开发. 几十个千电子伏能量入射离子探测的元素有 Li、Be、C、Ne、Na、Mg、Al、Si、P、S、Ar、Ti、V、Cr、Mn、Fe、Co、Ni、Cu 和 Ga. 可以从相关图容易估计靶-靶碰撞中激发的芯能级,这些芯能级是 Li 到 C 的 K 能级, Na 到 Ar 的 L, K 到 Ru 的 M 以及 Rb 到 Ra 的 N. 一般来说,灵敏度随入射离子能量增加而增加,随壳层的轨道半径的减小(束缚能的减加)而减小,随被提的电子数目的增加而增加. 其外,当碰撞能量不变时,入射粒子和靶原子质量愈接近,则灵敏度也愈高. 总之,低能离子感生的俄歇电子谱学会得到原子碰撞过程的基本信息,有待于进一步开发和利用.

三 中性和离子感生辐射分析表面组分 (SCANIIR)

同一低能离子束轰击固体,即使束流强度不高,也会发射可见光. 但这种现象直到最近几年才有一些定量研究,原因是: (i) 光发射对材料的化学特性极为灵敏; (ii) 要求表面清洁. 因此,实验时要求超高真空和靶表面清洁技术. 由于大多数发射的光是可见光和紫外光,实验装置比较简单,一个单色仪或一个摄谱仪同靶室光学连接起来就可以了. 在深度剖面的测量中,把溅射物质的特征谱线看成是表面腐蚀量的函数. 这时选取较高的腐蚀率以缩短测量时间.

离子轰击固体材料产生的光谱常常是一组很尖的谱线,有时因谱线重叠而形成宽带结构. 图 4.7-20 是 40 千电子伏的 Ar^+ 离子轰击 Si、Pd 和 W 靶得到的谱线. 从靶物质的特征原子谱线(未标出)看来是很丰富的,还有单电离 (II) 和双电离 (III) 物质的谱线,以及杂质原子 (AlI) 和分子物质 (CH) 的谱线. 这些表征自由原子、分子或离子特征的发射谱线表明这些粒子的退激是在离固体表面有一定距离处发生的. 溅射产额大且谱线是由溅射

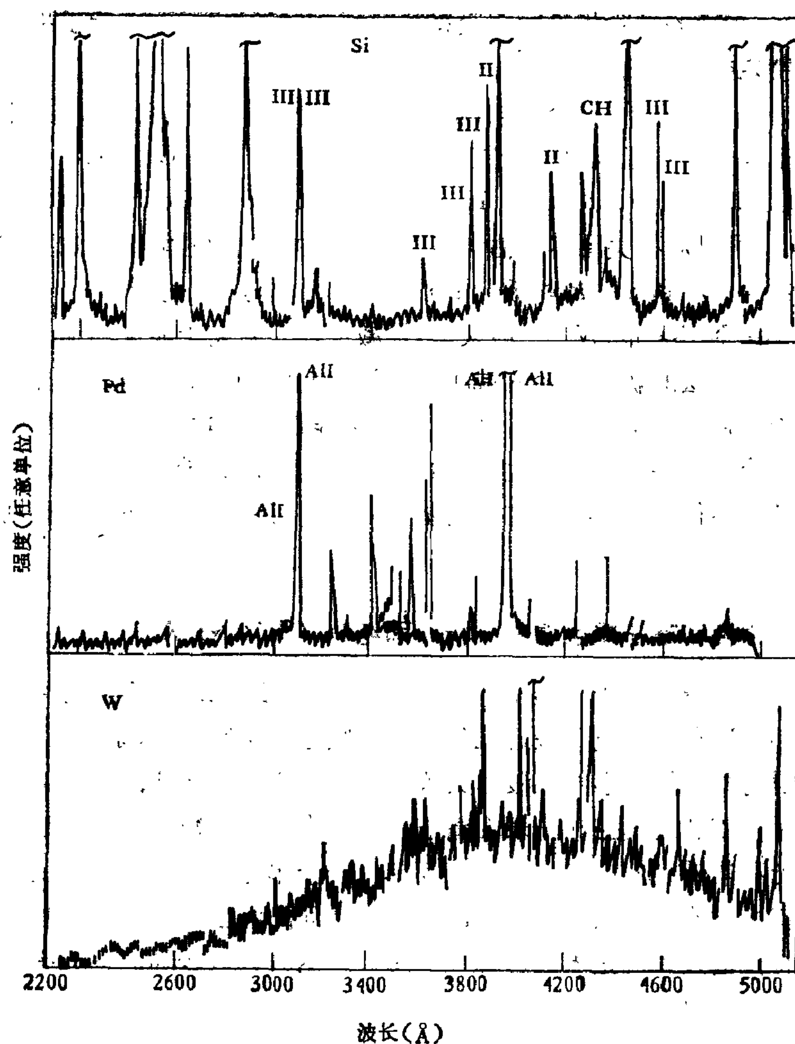


图 4.7-20 40千电子伏 Ar^+ 轰击 Si, Pd 和W靶所得到的光谱[41]

靶粒子发射的. 用作组分分析时只要把特定物质的特征谱线找出来就能确定该种物质.

诚然,发射谱不限溅射粒子.在轻粒子(如H和 He)轰击重靶时溅射产额很低,发射谱主要是由中性或电离的背散射粒子发射

的．重离子轰击时还有宽带发射，尤其是过渡金属靶，宽带发射很强(如图 4.7-20 中钨)．宽带发射可能来源于固体表面之外，也可能属于溅射金属氧化物，还可能产生于固体表面，这种情况对于轻离子(中性子)轰击绝缘体时为多见．发射光谱线的强度同粒子最后离开固体表面所处的状态（电离状态还是激发态，或是两者均有）有关，这一点与二次离子质谱类似．不过二次离子质谱中电离粒子是由溅射过程本身发射的，或者是中性溅射粒子但为表面过程所电离．在 SCANIIR 中，人们关心的是溅射粒子的电子激发能级的相对布局以及在表面区域这些激发能级的各种退激几率．当然，这些谱线的认识对理解表面过程是很有意义的，目前还只有一些半经验的描述．

现在知道一些清洁金属表面溅射原子发射光谱强度、多普勒展宽和多普勒位移、谱线形状同离子轰击能量之间的关系．同这个过程相竞争的是发射二次电子而没有辐射的退激过程——这就是前二节所说过的激态原子的共振电离 (RI) 和俄歇退激过程（图 4.7-1 的 (b) 和 (f))．因此，一个处在激态溅射原子的辐射跃迁几率是

$$P(v)=e^{-A/(av)}\tag{4.7-14}$$

v 是溅射原子沿表面垂直方向的速度．因此，溅射粒子速度愈快，发生辐射跃迁的几率也愈大，因为入射粒子能量高时，同表面激烈碰撞，溅射粒子处于电离状态的可能性大大增加．

溅射过程发射光谱同化学效应关系也很密切．当金属氧化物被离子轰击或者是把氧放到溅射室，金属原子发射谱线强度要比纯金属样品发射谱线强度大大增强，因为绝缘氧化层的形成削弱了上述的无辐射退激过程．固体中的带隙只留下少数结合松的电子给俄歇退激和少数能级给共振电子转移．所以，构成溅射粒子大多数的慢溅射粒子都是通过辐射跃迁来退激．这同绝缘体中退激效率比金属中高的实验事实相符合．

总之，溅射粒子光发射易于探测和鉴定，因此在表面组分分析中是一个值得重视的方法．

§ 4.8 溅射物理的应用

溅射物理的应用是很广泛的，它已成为现代科学技术中不可缺少的工具之一。除了上面已经提到的各种固态表面的分析方法外，溅射在其它方面的应用也是不可忽视的。这里只能扼要的说明一下。

现代溅射镀膜技术不仅可镀制大到几平方米面积的大膜面，也能够镀制小到微电子区的小膜面，而且对各种材料、如金属、绝缘体、陶瓷、化合物、有机物等都可进行镀制。特别是镀制超导体薄膜，目前已不下数十种，例如 Nb-Ge 超导膜，它的转变温度高达 23K，受到普遍重视。

离子蚀刻在微细加工方面是一种极重要的技术，它的主要优点是没有化学腐蚀所带来的"钻蚀"现象，同时也可以对任何材料甚至多层薄膜进行加工。离子磨削可以对非球面和其它复杂形状的表面进行加工和抛光。离子加工是一项重要的新技术，其优点如下：(i) 是一种化学清除过程，但又对靶原子的化学性质不敏感；(ii) 它既不会磨损又不变形(作一种工具而言)；(iii) 深度和空间位置的公差可以控制在 100—500A 之间；(iv) 被加工的工作面没有应力存在，这些都是机械加工无法办到的。

离子溅射在生物大分子研究的应用，也很有趣。例如，(i)"离子溅射显微术"。利用离子溅射和扫描电镜可对生物细胞进行研究。当一定能量的氢离子轰击人的血红细胞，发现新老细胞的侵蚀率不同，细胞中心凹陷部分和周围的突起部分的侵蚀率也不相同。特别有病变细胞比无病变细胞更加耐腐蚀这一点是很有意思的。侵蚀率的不同暗示组织结构有变化或者产生了更加抗腐蚀的物质。(ii)"离子溅射质谱术"。离子溅射不仅可以改变生物大分子的貌相，同时还可以把它们从生物样品中解吸出来。这种现象已开始用来试制成一种新型的质谱仪[78]，其优点不仅结构简单，造价低廉，而且灵敏度很高，可用于那些热不稳定，挥发极低甚至不

挥发样品的分析.利用这种质谱仪可对生物大分子进行结构、动力学过程的研究。例如对 1,25-$(OH)_2$-D_3 的研究,不仅在临床上很重要,而且用其它质谱仪无法测量的.

在天体物理学和宇宙科学方面的应用也很有意思. 例如太阳风对宇宙飞行器的溅射、对月球表面的择优溅射等等都有重要意义. 高能粒子对很多物质的溅射具有"异常"大的溅射产额，这是一般理论无法解释的，但这种类型的溅射很可能是理解行星表面变化和行星冕形成的原因.

附录　向前和向后玻耳兹曼方程的联系

本附录给出玻耳兹曼方程向前和向后形式之间的联系，并从 (4.2-5) 式推出 (4.2-6) 式. 先列入传播子函数 G 由

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) = \int d^3r_0 \int d^3v_0 G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0) F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t) \tag{A.1}$$

给出，式中 $t \geqslant t_0$，使

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t_0; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) \tag{A.2}$$

显然，若已知 t_0 时刻的分布便可由传播子产生 t 时刻的分布函数. 容易看出 G 满足 (4.2-5) 式，并且 $G' = G(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t)$ 和 $G'' = G(\mathbf{r}, \mathbf{v}'', t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0)$，也即是说，传播子满足(向前)玻尔兹曼方程.

把 (A.1) 式付 t_0 微分，并将 (4.2-5) 式代入 $\frac{\partial}{\partial t_0} F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0)$ 则有，

$$0 = \int d^3r_0 \int d^3v_0 F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0) \frac{\partial}{\partial t_0} G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0)$$
$$- \int d^3r_0 \int d^3v_0 G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0) \mathbf{v}_0$$
$$\cdot \nabla_{r_0} F(r_0, v_0, t_0) - \int d^3r_0 \int d^3v_0$$
$$\times G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0) N \int d^3v' \int d^3v''$$

$$\cdot [v_0 F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0)\sigma(\mathbf{v}_0; \mathbf{v}', \mathbf{v}'')$$
$$- v' F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}', t_0)\sigma(\mathbf{v}'; \mathbf{v}_0, \mathbf{v}'')$$
$$- v'' F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}'', t_0)\sigma(\mathbf{v}''; \mathbf{v}', \mathbf{v}_0)] \qquad (A.3)$$

将上式第二项对 t_0 进行分部积分并在第三项中代入积分变量，便可化成

$$0 = \left(\frac{\partial}{\partial t_0} + v_0 \cdot \nabla_{r_0}\right) G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t_0)$$
$$- N v_0 \int d^3 v' \int d^3 v'' \sigma(\mathbf{v}_0; \mathbf{v}', \mathbf{v}'')[G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t)$$
$$- G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}', t_0) - G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}'', t_0)] \qquad (A.4)$$

$F(\mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, t)$ 是一个 任意分布，根据时间和空间平移不变性原理，有

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{r}_0, \mathbf{v}', t_0) \equiv G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}, t - t_0) \qquad (A.5)$$

所以

$$\left(\frac{\partial}{\partial t_0} + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla_{r_0}\right) G = -\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}_0 \cdot \nabla_r\right) G \qquad (A.6)$$

把 $(A.6)$ 式插入 $(A.4)$，令 $r_0 = 0$，$t_0 = 0$ 且 $\mathbf{v}$ 和 $\mathbf{v}'$ 交换可得

$$-\left(\frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla_r\right) G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_0, t) = N v \int d^3 v'$$
$$\times \int d^3 v'' \sigma(\mathbf{r}; \mathbf{v}', \mathbf{v}'') \cdot [G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}_0, t)$$
$$- G(\mathbf{r}, \mathbf{v}', \mathbf{v}_0, t) - G(\mathbf{r}, \mathbf{v}'', \mathbf{v}_0, t)]. \qquad (A.7)$$

这就是 (4.2-6) 式，也就是说，传播子也满足背式玻耳兹曼方程 $(A.7)$ 式。

对于一个初粒子产生的碰撞级联，有

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, 0) = \delta(\mathbf{r})\delta(\mathbf{v} - \mathbf{v}_0) \qquad (A.8)$$

此时，$r_0 = 0$，$t_0 = 0$。$(A.2)$ 式和 $(A.8)$ 式比较，分布函数 F 和传播子是一样的，即

$$F(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \equiv G(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t; \mathbf{o}, \mathbf{v}_0, 0) \equiv G(\mathbf{r}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v}, t) \qquad (A.9)$$

所以，采用哪一种玻耳兹曼方程(是向前的还是向后的)推导分布函数的表达式完全视怎样方便而定。在文献[1]中采用的是向后形式，这样可直接推出总溅射产额(即对溅射原子能量和角分布积分)。

参 考 文 献

[1] P. Sigmund, *Phys. Rev.*, **184**, 383(1969).

[2] M. W. Thompson, *Phil. Mag.*, **18**, 377(1968).

[3] H. H. Andersen, H. L. Bay, *J. Appl. Phys.*, **45**, 953(1974).

[4] O. Almén and G. Bruce, *Nucl. Instr. Meth.*, **11**, 279(1961).

[5] H. H. Andersen and H. Bay, *Rad. Effects*, **13**, 67(1972).

[6] R. Behrisch (ed.): Sputtering by Particle Bombardment II, Topics in Applied Physics, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1982).

[7] 王广厚：金属离子簇的物理性质， 南京大学固体物理所学术讨论会上的报告(1984).

[8] N. Matsunami, Y. Yamamuura and N. Itoh, *Rad. Eff. Lett.*, **50**, 39(1980).

[9] R. Behrisch (ed.), Sputtering by Particle Bombardment I, Topics in Applied Physics, Springer, Berlin, Heidelberg, New York (1981).

[10] P. Sigmund., *Rev. Roum. Phys.*, **17**, 1079(1972).

[11] J. Lindhard, V. Nielson, M. Scharff, P. V. Thomsen., K. Dan. Vidensk. Selsk., *Mat. Fys. Medd.*, **33**, No. 10(1963).

[12] K. B. Winterbon, P. Sigmund, J. B. Sanders, K. Dan Vidensk. Selsk., *Mat. Fys. Medd.* **37**, No. 14(1970).

[13] M. W. Thompson, *Phil. Mag.*, **18**, 377(1968).

[14] G. Blaise and G. Slodzian, *Rev. Phys. Appl.*, **8**, 105(1973).

[15] H. Oechsner, *Appl. Phys.*, **8**, 185(1975).

[16] Z. Jurela, *Rad. Effects*, **19**, 175(1973).

[17] G. Blaise, Material Characterization Using Ion Beams (eds: J. P. Thomas and A. Cachard), Plenum Press, New York (1978), p143.

[18] U. Littmark, P. Sigmund, *J. Phy. D.*, **8**, 241(1975).

[19] N. Matsunami, et al., *Rad. Eff. Lett.*, **50**, 39(1980).

[20] Y. Yamamura, N. Matsunami and N. Itoh, *Rad. Eff.*, **75**, 65(1983).

[21] D. Onderdelinden, *Can. J. Phys.*, **46**, 739(1968).

[22] P. Sigmund, *Appl. Phys. Lett.*, **25**, 169(1974); **27**, 52(1975).

[23] Y. Yamamura, Y. Kitazoe, *Rad. Eff.*, **39**, 251(1978).

[24] P. Sigmund and C. Claussen, *J. Appl. Phys.*, **52**, 990(1981).

[25] S. S. Johar and D. A. Thompson, *Surf. Sci.*, **90**, 319(1979).

[26] N. Andersen and P. Sigmund, K. Dan. Vidensk. Selsk., *Mat. Fys. Medd.*, **39**, No. 3(1974).

[27] G. Betz, *Surf. Sci.*, **92**, 283(1980).

[28] Hayune Shimizu, Masatoshi Ono and Katsuya Nakayanna, *Surf. Sci.*, **36**, 817 (1973).

[29] M. Szymonski, *Phys. Lett.*, **82A**, 203(1981).
[30] M. Szymonski, *Nucl. Instr. Meth.*, **194**, 523(1982).
[31] G. Carter, *Rad. Effects Lett.*, **57**, 89(1980).
[32] Z. Stroubek, *Surf. Sci.*, **44**, 47(1974).
[33] L. I. Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill, New York, p282(1968).
[34] J. K. Nørskov and B. I. Lundqvist, *Phys. Rev. B.*, **19**, 5661(1979).
[35] Z. Sroubek, *Nucl. Instr. and Meth.*, **194**, 533(1982).
[36] Z. Stroubek, K. Zdansky and J. Zavadil, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 580(1980).
[37] A. Benninghoven, Chemistry and Physics of Solid Surfaces (eds: R. Vanselow and S. Y. Tong) Rubber Company, Cleveland, (1977) p. 207.
[38] P. Fayet, R. Keller and L. Woste, 中国激光 (1983).
[39] M. Leleyter and P. Joyes, *Rad. Eff.*, **18**, 105(1973).
[40] M. Leleyter and P. Joyes, *J. Physique*, **37**, L303(1976).
[41] W. F. Van der Weg and E. Lugujjo, in "Ttomic Collisions in Solids", (eds: S. Datz, B. R. Appleton, and C. D. Moak) p. 511. Plenum Press, N. Y. (1975).
[42] P. A. Baragiola, *Rad. Eff.*, **61**, 47(1982).
[43] D. W. Vance, *Phys. Rev.*, **169**, 252(1968).
[44] H. D. Hagstrum, In Electron and Ion Spectroscopy of Solids, (eds, L. Fiermans, J. Vennik, and W. Dekeyser), Plenum, N. Y., p273(1978).
[45] G. Wentzel, *Z. Physik*, **43**, 524(1927).
[46] H. D. Hagstrum and G. E. Becker, *Phys. Rev.*, **B8**, 1592(1973).
[47] H. D. Haqstrum and T. Sakurai, *Phys. Rev. Letters*, **37**, 615(1976).
[48] J. T. Grant, In Characterization of Metal and Polymer Surfaces, (ed. L. H. Lee) Academic, N. Y. Vol 1. p. 133(1977).
[49] P. J. Feibelman, E. J. McGuire, *Phys. Rev.*, **B17**, 690(1978).
[50] F. P. Larkins, *J. Phys.*, **B5**, 571(1972).
[51] K. Taulbjerg and J. S. Briggs, *J. Phys.*, **B8**, 1895(1975).
[52] W. E. Meyerhof and K. Taulbjerg, *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **27**, 279(1977).
[53] R. A. Baragiola, *Phys. Rev.*, **A19**, 2470(1979).
[54] J. J. Mackey, L. E. Smith, B. M. Johnson, C. F. Moore, and D. L. Matthews, *J. Phys.*, **B7**, L447(1974).
[55] K.-O. Groeneveld, G. Nolte, S. Schumann, and K. D. Sevier, *Phys. Lett.*, **56A**, 29(1976).
[56] M. Nègre, J. Mishler and N. Benazeth. *Surface Sci.*, **107**, 562(1981).
[57] R. A. Baragiola, *Springer Series in Chemical Physics*, **17**, 39(1981).

第五章　带电粒子在晶体中的沟道效应

早在 20 世纪初，斯托克 (Stark) 就预言过晶体存在沟道的现象[1]，但是直到 60 年代初才为戴维斯 (Davies) 等人在实验上观察到[2]. 现在不仅观察到了带正电粒子在晶体中沿晶轴（或主平面）方向运动时的沟道效应，而且也观察到了负电粒子和中性粒子的沟道效应；不仅对于轻离子而对一些较重的离子，能量范围从千电子伏到吉电子伏均观察到沟道效应. 不同粒子在不同能量范围，沟道效应可有不同（见表 1.2-1). 本章重点讨论能量从几百千电子伏到几兆电子伏较轻的带电粒子，如 $^1H^+$，$^2H^+$ 和 $^4He^+$ 离子在晶格中运动的基本规律. 第六章则是它的应用，后面还有提到很高能量(上百吉电子伏)粒子在晶体中运动的沟道效应及应用；最后一章再论述带负电轻粒子的沟道效应及其产生的辐射.

§ 5.1　沟道效应和连续模型

一　晶格的取向和沟道

物质中原子排列往往确定着物质的性质，例如，固体碳有两种结构，即六角晶系的石墨和立方晶系的金刚石，它们的力学性质和光学性质非常不同，带电粒子在晶体和非晶态物质（包括多晶或沿晶体非沟道方向）中的运动是怎样的？前面几章所讨论的内容是带电粒子在无定形物质中的运动及所发生的现象*)，现在要讨论带电粒子在晶体中的运动规律. 为了认识这个问题，我们首先对晶体的方向作一些说明.

在晶体靶中，原子组成点阵，它们在空间上是有规则排列的.

*) 在 (4.2-60) 式已经给出晶体方位对溅射产额的影响.

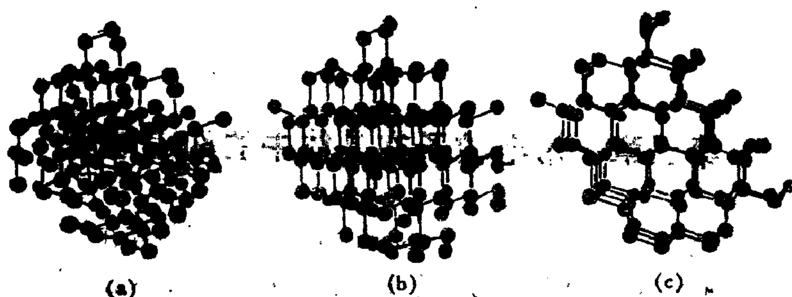


图 5.1-1　金刚石型晶体的原子模型：分别沿 (a) 随机方向 (b) 晶面方向 (c) 晶轴方向观察

图 5.1-1 示出沿不同方向观察到的金刚石型晶体的原子排列模型．可以看到，一个离子沿图 5.1-1(a) 所示的方向（叫随机方向）入射到晶体上同靶原子近碰的机会很多，如果沿着晶体主轴［图 5.1-1(c)］或晶面方向［图 5.1-1(b)］入射，则同靶原子近碰的机会大大地减少了．与近碰有关的卢瑟福背散射，能量损失、二次电子散射、核反应和 X 射线产生等过程都相应地减弱．为了简化起见，假定晶格内原子排列如图 5.1-2 所示，来考察入射粒子在沟道中运动情况．首先，入射粒子与沟道轴成不同角度地入射到沟道的中点［图 5.1-2(a)］，可把各种可能的轨迹分成三种类型：粒子 A 同沟道轴成小角度进入晶体，不与点阵原子列发生强烈的相互作用，只是经过一系列相互关联的小角偏转，继续沿沟道方向前进，为完全沟道粒子．B 型离子与原子列成大的角度进入晶体，同原子列相交并发生近碰，经过通常的多重散射，成为随机方向的运动轨迹，其射程近似同非晶材料中一样．C 型轨道是一种特殊情形，叫作准沟道情形．在连续模型适用的情况下，这些离子的穿透很接近原子列，以致任何摆动都是极不稳定的．然而，准沟道粒子靠近沟道壁期间，它的多次碰撞是相关的，并且在这个短距离内，它作用的原子数比它在无规则固体内运动同样距离所作用的原子数还多．对于完全平行的入射束并且对准沟道入射，也能观察到上述三种情况，如图 5.1-2(b) 所示．因为一个入射粒子初始位置决

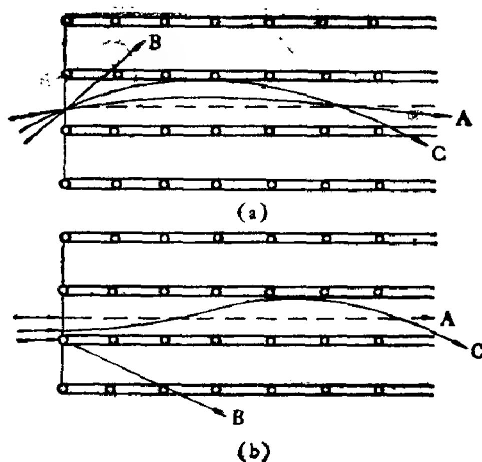


图 5.1-2 离子进入沟道各种运动轨迹的图象表示. (a) 是入射离子 A. B. C 以不同角度射到沟道中心点上进入沟道的运动; (b) 为平行入射束流,但 A. B. C 进入沟道时的位置不同

定着它同靶原子列碰撞参数的大小，从而也直接影响到它在晶格中运动轨迹. 那些靠近原子列粒子 B 立刻被散射，粒子 A 在沟道中心,沿沟道一直前进. 当然由于晶格内场在沟道中不均匀,特别是电子散射作用，A 粒子轨道也不可能完全是直线前进. 粒子 C 和图 5.1-2(a) 的 C 粒子类似，是准沟道粒子. 由此看来，完全沟道离子 (A 型) 近距离碰撞的机会比正常(指随机方向)机会少,而准沟道离子 (C 型) 比正常的机会多. 因此,沟道离子的卢瑟福背散射产额降低，准沟道离子的卢瑟福产额增加. 有些离子开始是沟道离子 (A 型),当它们减速时，被散射出沟道(变成 B 型). 图 5.1-3 所示的实验结果是把产额 Y 画作入射束与沟道轴线夹角 ϕ 的函数. 在入射角大时,不会有沟道，得到产额 Y_R，它和在原子密度相同的无规则靶上得到的产额相同.对于完全对准 ($\phi=0°$) 的情形,大部分束将是沟道束,得到最小对准产额 Y_A，这里 Y_A 常是 Y_R 的 5% 或更小.

图 5.1-3 的产额曲线示出一个"坑"(又叫沟道坑)和一个"肩". 坑是沟道离子形成的,一般认为"肩"是准沟道粒子的贡献. 此时,

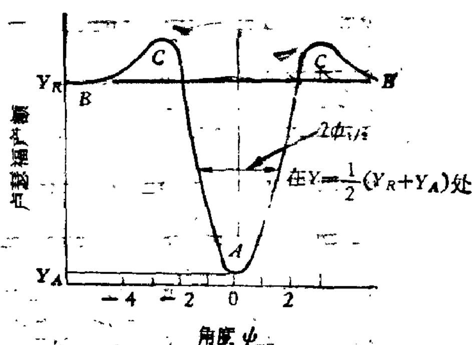


图 5.1-3 图 5.1-2 所示的各种离子在晶格中运动轨迹相对应的卢瑟福散射产额的形式

得到最小产额定义为 $\chi_{\min}=Y_A/Y_R$. 另外，由于图 5.1-3 是以沟道产额对束的入射角作图，在产额值为 1/2 (Y_R+Y_A) 处，测量这条曲线的角度半宽度 $\psi_{\frac{1}{2}}$，可以作为临界角 ψ_C 的一种量度.



图 5.1-4 2.43 兆电子伏质子沿 60 微米厚 Ge 晶<111>轴向入射时，透射粒子的星形图案. 色调深的区域对应着粒子强度高的区域. 2.43 兆电子伏质子在非晶 Ge 中的射程约为 43 微米[3]

如果靶晶足够薄，入射束能透过，但又要一定的厚度，足以产生一定的多重散射，那么，透射束主要集中在接近入射束处的主晶轴和主晶平面. 这时，如果在靶的另一边放上荧光屏或照相板，就会观察到星形图案(图 5.1-4). 这些图案在沟道实验中确定晶体方位是很有用的. 若晶体很薄，透射图案比较复杂，但仔细测量会提供沟道轨迹的详细信息.

在图 5.1-2 中可看出，由于沟道离子远离形成沟道墙的原子列，同原子列上的原子核碰撞几率很小，所以核阻止能力小，而且沟道离子运动是在开道中电子密度低的区域，所以由电子阻止引起沟道离子的能量损失也远比非

沟道离子弱(大约是其一半).

二 轴沟道的连续模型

由图 5.1-2 所示，沟道粒子同晶格原子每次碰撞的散射角必须很小. 在经典近似下，就是说，每次碰撞参数比较大，即远大于原子核的大小. 因此，入射离子同原子相互作用是通过为原子周围电子云所部分屏蔽了的库仑势. 如果离子电荷为 Z_1e，靶原子电荷为 Z_2e，两者之间的距离为 r，则相互作用势由 (2.2-8) 和 (2.2-9) 式给出，重写如下:

$$V(r)=\frac{Z_1Z_2e^2}{r}u\left(\frac{r}{a}\right) \tag{5.1-1}$$

$$a=0.8853a_0(Z_1^{2/3}+Z_2^{2/3})^{-\frac{1}{2}} \tag{5.1-2}$$

u 为托马斯-费米屏蔽函数，a 为屏蔽长度. 由 § 2.2 可知，托马斯-费米屏蔽函数只能有数值解，一般取近似值. 莫雷尔 (Molière) 给出了很好的近似表达式[4]

$$u_M\left(\frac{r}{a}\right)=\sum_{i=1}^{3}\alpha_i\exp\left(-\frac{\beta_i r}{a}\right) \tag{5.1-3}$$

$$\{\alpha_i\}=\{0.1,\ 0.55,\ 0.35\}$$

$$\{\beta_i\}=\{6.0,\ 1.2,\ 0.3\}$$

而林哈德给出的标准势虽然不如上式精确，但特别简单，

$$u_L\left(\frac{r}{a}\right)=1-\left(1+\frac{C^2a^2}{r^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{5.1-4}$$

式中 C 为常数，取 $C\simeq\sqrt{3}$.

沟道连续模型的基本思想是，沟道离子同晶格原子列的碰撞是由许多次小角散射决定的，每次碰撞使离子的轨迹偏转一点点，因此，离子在沟道中运动的轨迹是由许多次相关碰撞决定的，如图 5.1-5 所示. 把晶格原子对离子的作用看作不是单个原子同入射离子的作用，而是像一条连续的原子“串”对运动离子的作用. 这时离子受到的力是连续的平均的. 所以，它们之间的相互作用可看

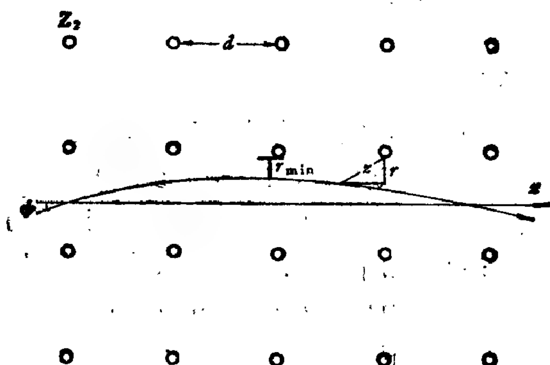


图 5.1-5 沟道的原子列模型及参数表示

作沿着原子列的平均势同离子的作用.

根据简单的叠加原理将原子间势沿原子列求平均就可推出连续势 $U(r)$，即

$$U(r)=\frac{1}{d}\int_{-\infty}^{\infty}V(z^2+r^2)dZ \qquad (5.1\text{-}5)$$

式中 r 是离子位置到原子列的垂直距离， d 是原子列上原子之间的平均距离. 用(5.1-1)和(5.1-4)式代入，得

$$U(r)=\frac{Z_1Z_2e^2}{d}\ln\left(\frac{C^2a^2}{r^2}+1\right) \qquad (5.1\text{-}6)$$

这就是林哈德标准连续势[5]. 由于数学上处理比较方便，这种分析表达式经常用到. 莫雷尔势则更接近于托马斯-费米原子势，但由于在考虑原子列时，数学上需要用数值解，

$$U_M(r)=\frac{Z_1Z_2e^2}{d}\sum_{i=1}^{3}\alpha_iK_0\left(\beta_i\frac{r}{a}\right) \qquad (5.1\text{-}7)$$

其中 α_i 和 β_i 为常数，K_0 是第二类修正的贝塞尔函数.

关于连续势模型的近似程度和适用性，林哈德已经讨论过，[5] 即是，粒子速度在平行于沟道轴(或沟道平面)方向的分量能使粒子穿过晶格原子间距的时间小于同单个靶原子的碰撞时间. 这意味着，当粒子感到它自己是在一个原子的库仑场中时，离子已经跑

到“列”上的下一个原子势场中，所以离子只能观察到连续的势，而看不到单个原子的场．数学上这种连续近似的条件可写成

$$\frac{r_{\min}}{v\sin\phi} > \frac{d}{v\cos\phi} \tag{5.1-8}$$

接近原子列的最小距离 $r_{\min}$ 由下式决定：

$$U(r_{\min}) = \frac{1}{2}M_1(v\sin\phi)^2$$

$$\simeq \frac{1}{2}M_1 v^2\phi^2 = E\phi^2 \tag{5.1-9}$$

这里 M_1 是离子质量及 E 是离子的动能．显然，存在一个最大入射角——临界角 ϕ_C，比这个入射角小的离子进入晶体都受到原子列（连续势）导向．这个临界角可由粒子入射到晶体上的临界横能量 $E\phi_C^2$ 等于最接近原子列时的横能量来定义．由 (5.1-9) 式得

$$\phi_C = \sqrt{\frac{U(r_{\min})}{E}} \tag{5.1-10}$$

由于连续势数量级为 100 电子伏，如果入射粒子能量为兆电子伏，ϕ_C 的数量级约 0.01 弧度，约 1 度．

如果仅考虑热振动振幅对最小距离的影响，可令 $r_{\min} = \rho_2$（ρ_2 是热振动振幅的均方值），将 (5.1-6) 式代入 (5.1-9) 式，得到临界角 ϕ_C 的一级近似表达式

$$\phi_C(\rho_2) = \frac{\phi_1}{\sqrt{2}}\left|\ln\left[\left(\frac{C_a}{\rho_2}\right)^2 + 1\right]\right|^{1/2} \tag{5.1-11}$$

其中

$$\phi_1 = \sqrt{\frac{2Z_1Z_2e^2}{Ed}} \tag{5.1-12}$$

当小距离 $r \ll C_a$ 时，原子列势的 (5.1-6) 式可近似为

$$U(r) = \frac{2Z_1Z_2e^2}{d}\ln\frac{C_a}{r} \tag{5.1-13}$$

这时离子很接近原子列，(5.1-13) 式会精确地给出 $r_{\min}$．于是，方程 (5.1-8) 的条件变成

$$\frac{C_a}{\psi d}\exp\left(-\frac{\psi^2}{\psi_1^2}\right)>1 \qquad (5.1-14)$$

随着 ψ 从零逐渐增大，若 $C_a/\psi d$ 保持不减小，则由于指数减小使不等式（5.1-10）不再成立．因此，连续模型的成立条件为

$$\psi < \psi_1 \qquad (5.1-15)$$

此时能量 E 满足 $E > 2Z_1Z_2e^2d/a^2$．对金刚石晶体，此值大约为10千电子伏．

ψ_1 在沟道效应中的意义是这样的：如果离子入射角 ψ 小于 ψ_1，离子在晶格中的运动受到连续势的控制，并且是沟道的运动．此时离子被原子列导离而不会接近到屏蔽距离以内．因此，一切同晶格原子的近碰过程都大大减弱．那些入射角 ψ 远大于 ψ_1 的粒子不受连续势的影响，其运动轨迹像在随机介质中一样．由于临界角 ψ_C 和 ψ_1 是同一数量级，而且 ψ_C 很难实验直接测量，因此，常常用 ψ_1 来代替 ψ_C 求出临界角的估计值．而 ψ_1 和 ψ_C 的关系除了（5.1-11）式给出一种近似外，林哈德把它写成一般的关系 $\psi_C \simeq \alpha\psi_1$，其中 α 大约在1到2之间．

实验上，确定临界角是测量表面下近碰几率同束流与晶体对称轴方向夹角之间的关系．即沟道坑的半宽度（图5.1-3），即半角 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 作为临界角的量度．它与 ψ_1 的关系为

$$\psi_{\frac{1}{2}} = C\psi_1 \qquad (5.1-16)$$

C 与原子振动的振幅有关，图5.1-6是测量各种物质的半角 $\psi_{\frac{1}{2}}$．更精确的临界角公式是从计算机模拟沟道过程推出的，记为 ψ_C^B[6]．表5.1-1为1.0兆电子伏 He^+ 沿几种晶体〈100〉方向的临界角．无论

表 5.1-1　1.0 兆电子伏 He^+ 离子沿几种晶体〈100〉方向的临界角

晶　体*)	ψ_1	$\psi_C(\rho_z)$	ψ_C^B	$\psi_{1/2}$
Si	0.70	0.71	0.60	0.63
Ge	1.03	0.89	0.77	0.80
W	2.10	2.17	1.81	1.97

*) 晶格〈100〉参数和室温下热振动振幅：Si，$d=5.43$ Å，$\rho_2=0.106$ Å；Ge，$d=5.66$ Å，$\rho_2=0.12$ Å，W，$d=3.16$ Å，$\rho_2=0.064$ Å．

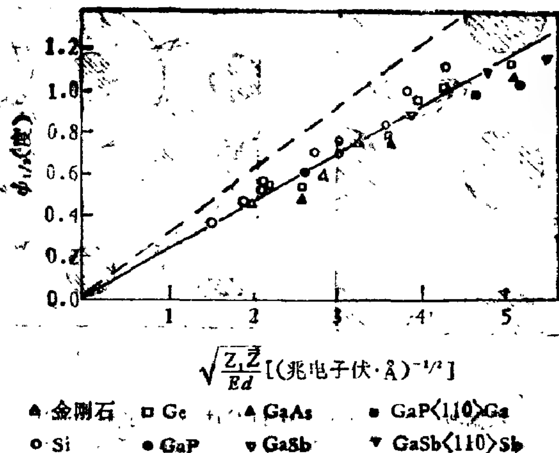


图 5.1-6 $\psi_{1/2}$与参数 $\sqrt{Z_1\bar{Z}/Ed}$ 之间关系. $\bar{Z}$ 和 $\bar{d}$ 分别表面原子平均数和平均间距. 虚线是方程(5.1-12)式 ψ_1

图 5.1-6 还是表 5.1-1 的数字均说明，沟道的临界角是一个相当确定的量，估计误差大约在 10—15%以内. 方程(5.1-12)式给出正确的函数关系，但一般得到值比实验值 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 高，但 ψ_c^B 与 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 更接近些.

由 (5.1-12) 式的 ψ_1 定义，林哈德标准势 (5.1-6) 式变为

$$U(r)=\frac{E\psi_1^2}{2}\ln\left(\frac{C^2a^2}{r^2}+1\right) \tag{5.1-17}$$

在连续模型近似下，一个质量为 M_1 的离子在沟道 z 方向与原子列成小角 ψ 的运动可用哈密顿

$$H=\frac{1}{2M_1}(P_z^2+P_\perp^2)+U(r_\perp) \tag{5.1-18}$$

来描写，式中 P_z 是动量沿 z 方向的分量，$P_\perp=(P_x, P_y)$ 是动量垂直于原子列的分量，叫横动量. $r_\perp=(x, y)$ 是离子在垂直于原子列平面(称横平面)的位置，$U(r_\perp)$ 是晶格总的连续势. 由于 U 与 z 无关，P_z 是运动常数（暂时忽略沟道中纵向的阻止能力），因此，粒子在沟道中的运动可以用在横平面 (x, y) 中的运动来描述. 而且，$U(r_\perp)$ 与运动的速度无关，故"横能量"

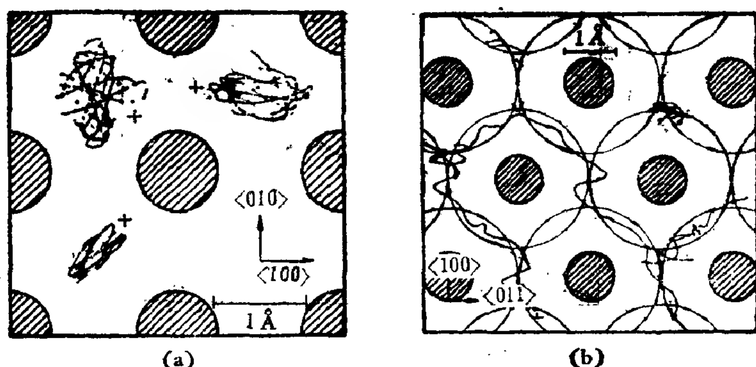


图 5.1-7 根据波尔势，1 千电子伏的 Cu^+ 入射到铜晶⟨001⟩沟道(a)和⟨011⟩沟道(b)后，离子轨道分别在(001)和(011)上的投影. +号为初始入射点. 每个离子进入晶体大约 30 毫微米(经过约 250 次碰撞)[7]

$$E_\perp = U(\mathbf{r}_\perp) + \frac{P_\perp^2}{2M_1}$$

$$\simeq U(\mathbf{r}_\perp) + E\phi^2 \qquad (5.1\text{-}19)$$

也是运动常数. 这就是说，沟道中离子能量的横向分量(忽略能量损失)是守恒的.

沟道理论的详细研究应解运动方程，这一点，就是在连续模型的二维情况下也是相当复杂的. 曾经计算过粒子在沟道中的运动轨道，[7]示于图 5.1-7. 是用 1 千电子伏铜离子射入面心立方铜点阵的⟨001⟩和⟨011⟩方向的情形. 离子进入位置用+表示，图中示出了它们穿透点阵的运动轨道在晶体表面平面上的投影. 可以看到，进入⟨001⟩沟道的离子是稳定的，保持在这个沟道内. 而进入⟨011⟩方向的离子，当它们在晶体中前进时，便从一个轴向沟道运动到另一个轴向沟道. 尽管如此，它的运动仍然不是随机的，而是受到原子排列的影响，每次碰撞之间是彼此相关的. 在离子进入晶体很短时间内，其运动轨道已经相当复杂了. 不过，由(5.1-19)式的横能量守恒原理，结合统计概念(§ 5.2)，将会使问题简化.

方程(5.1-18)的哈密顿中连续势可以分成两种模型：

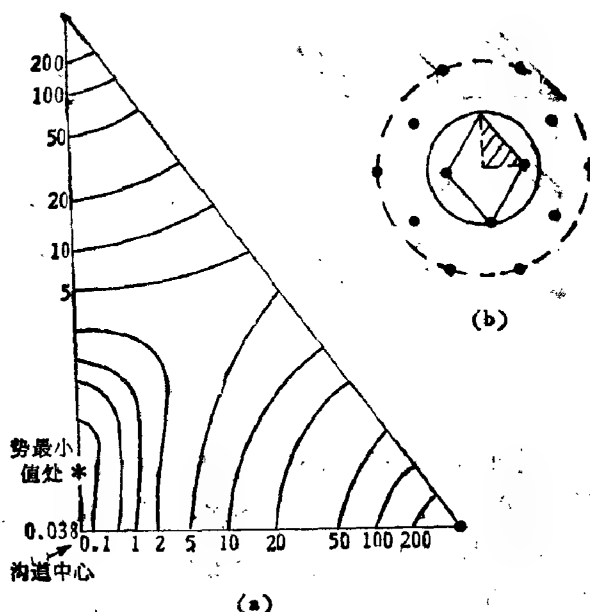


图 5.1-8 (a) 1 兆电子伏 He^+ 离子入射到 Al 晶〈110〉沟道中平均势的等值线图（单位是电子伏特），(b) 铝晶格〈110〉方向原子排列，实线圆圈是第一晶格，虚线圆圈是第二晶格. 三角形影线区域是 (a) 的区域

(i) 多列模型，[8] 沟道势必须考虑沟道边界各个相邻原子列势的叠加，因为在横平面内，原子列是一个二维晶格.

$$U_m(\mathbf{r}) = \sum_i U(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) - U_{min} \tag{5.1-20}$$

式中 U_{min} 是在取 $\lim U_m(r) = 0$ 时得到的. 这种二维周期性的势需要进行数值计算. 计算时相邻原子列的数目应取够，以保证原子列数目再增加时不对计算结果有很大的影响. 例如，单原子列势采用(5.1-7)式的莫雷尔势，计算 1 兆电子伏 He^+ 离子入射铝晶〈110〉沟道的等势线图，绘于图 5.1-8(a). 图 5.1-8(b) 给出〈110〉方向横平面内晶格原子列的排列，计算时一共包含 14 条原子列，考虑了各个相邻原子列对晶格〈110〉沟道平构势的贡献.

(ii) 单原子列近似[5] 沟道理论所关心的常常是靠近原子列所发生的近碰过程. 当粒子靠近原子列的距离小于 r_{min} 时就会发

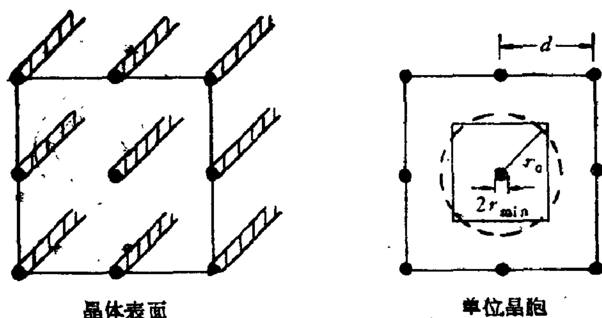


图 5.1-9　单原子列近似下，理想晶体单位晶胞示意图

生退道，而成为非沟道粒子(图 5.1-2)，所以，对沟道中心附近，势值最小区域的形状并不是很重要的. 因此，在近似情形下，常常只考虑横向晶格单位晶胞中只包含一个原子列，并且单位晶胞是圆柱形对称，其横截面积可用半径为 r_0 的圆面积来代替（如图 5.1-9），故有

$$\pi r_0^2 = \frac{1}{Nd} \tag{5.1-21}$$

式中 N 为晶体内原子密度，d 原子列之间的间隔. 选取林哈德标准势 (5.1-6) 式并假定 $U(r_0)=0$，可得到单原子列连续势

$$U_1(r) = \frac{E\psi_1^2}{2} \ln \left[\left(\frac{C^2a^2}{r^2}+1\right)\Big/ A\right] \tag{5.1-22}$$

及

$$A = \frac{C^2a^2}{r_0^2}+1 \tag{5.1-22a}$$

采用这个势的表达式，一个具有横能量 $E_\perp$ 的粒子靠原子列最接近的距离 r_{min} 是

$$U_1(r_{min}) = E_\perp \tag{5.1-23}$$

解得：

$$r_{min}^2 = C^2a^2\left(Ae^{\frac{2E_\perp}{E\psi_1^2}}-1\right) \tag{5.1-24}$$

在 $r_{min} \ll r_0$ 时，单原子列近似是适用的。

(5.1-22a) 式所给出的 A 是要经常用到的，但在考虑多原子列的贡献时，可把接近于第 n 个原子列的势写成

$$\begin{aligned} U_m(r) &= U(r) + \sum_{i\neq n} U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|) - U_{\min} \\ &\simeq U(r) + \sum_{i\neq n} U(|\mathbf{r}_n-\mathbf{r}_i|) - U_{\min} \\ &= U(r) - U_0 \end{aligned} \tag{5.1-25}$$

式中

$$U_0 \equiv U_{\min} - \sum_{i\neq n} U(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_i|) \tag{5.1-25a}$$

这样，在靠近原子列时有

$$U_m(r) = U_1(r) \tag{5.1-26}$$

$$U_1(r) = \frac{E\psi_1^2}{2}\ln\left[\left(\frac{C^2a^2}{r^2}+1\right)\Big/A_{\rm eff}\right] \tag{5.1-27}$$

$$A_{\rm eff} = \exp\left(\frac{2U_0}{E\psi_1^2}\right) \tag{5.1-27a}$$

当所取原子列数目增加时，(5.1-27a) 式计算的 $A_{\rm eff}$ 值很快达到一个极限值，并且与 (5.1-22a) 计算的结果有些不同. 这里所得到的值会更接近于多原子列势的结果， 表 5.1-2 给出金刚石中三个主轴方向得到的 A 和 $A_{\rm eff}$ 值.

表 5.1-2 金刚石三主轴方向单原子列势参数[5]

轴	A(5.1-22a)	$A_{\rm eff}$(5.1-27a)
⟨110⟩	1.278	1.151
⟨111⟩	1.340	1.613
⟨100⟩	1.394	1.595

从图 5.1-9 看出，在单原子列近似下，粒子非沟道部分的数量级为 $\pi r_{\min}^2/\pi r_0^2$. 当 $r_{\min} = \rho_2$ 时，约有 1—5% 的粒子是非沟道的. 近碰几率的测量(例如，背散射粒子的产额)是粒子非沟道部分的实验量度. 对于 $\psi = 0$ (图 5.1-2b)，这个量就是最小产额 $\chi_{\min}$. 由图 5.1-9 的几何形状和 (5.1-21) 式可很容易得到

$$\chi_{\min}(\rho_2) = Nd\pi\rho_2^2 \tag{5.1-28}$$

这个量的显著特点是与散射参数 Z_1, Z_2 和 E 无关，仅与晶格的性质有关. 经计算机模拟，得到一系列不同原子系统的最小产额公式

$$\chi^B_{\min} = 3Nd\pi\rho_2^2\sqrt{1+\left(\frac{\psi^B_C d}{1.55\rho_2}\right)} \tag{5.1-29}$$

表 5.1-3 将这些最小产额的计算同实验结果比较，可以得到 (5.1-28) 式对近碰产额的估计偏小.

表 5.1-3 最小产额值的比较*)

晶 体	$Nd\pi\rho_2^2$	$3Nd\pi\rho_2^2$	$\chi^B_{\min}$	$\chi^{实验}_{\min}$**)
Si	1.03×10^{-2}	3.10×10^{-2}	3.3×10^{-2}	2.9×10^{-2}
Ge	1.13×10^{-2}	3.39×10^{-2}	3.6×10^{-2}	4.2×10^{-2}
W	0.31×10^{-2}	0.92×10^{-2}	1.2×10^{-2}	1.0×10^{-2}

*) 计算最小产额值时 <100> 方向在室温下晶格参数是:
Si: $d=5.431$ Å, $\rho_2=0.11$ Å; Ge: $d=5.657$ Å, $\rho_2=0.12$ Å; W: $d=3.165$ Å, $\rho_2=0.07$ Å.

**) Si 和 Ge 的测量取自: G. Della Mea et al., in "Atomic Collisions in Solids" (eds: S. Datz. et al.) Plenum Press, New York, Vol. 2. p.811(1975).
W 的测量取自: B. R. Appleton and L. C. Feldman, in "Atomic collision Phenomena in Solids" edited by North-Holland, Amsterdam, p.417(1970).

三 晶格原子热振动的影响

在靠近原子列时，应考虑原子列上原子热振动对势的影响. 与温度有关的连续势应把 (5.1-5) 式对热振动振幅分布求平均. 这样，热振动修正的原子列势为[10]

$$U_{th}(r) = \int_0^\infty dP(s)U(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) \tag{5.1-30}$$

式中 $dP(s)$ 是横平面内热振动振幅分布

$$dP(r') = \frac{2s}{\rho_2^2}e^{-r'^2/\rho_2^2}dr' \tag{5.1-31}$$

ρ_2 是横平面内热振动均方振幅.

用标准势也不能得到 $U_{th}(r)$ 的分析形式解. 幸好热运动的影响只有在 r 很小时才起作用，采用 (5.1-13) 式的近似，于是

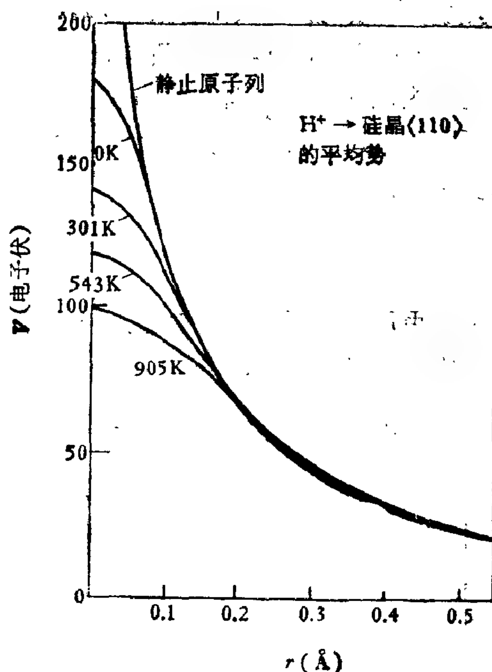


图 5.1-10 质子入射到 Si〈110〉方向在各种温度下的连续势[11]。离子-原子相互作用势是取莫里尔势(5.1-3)式

$$U_{th}(r) = \frac{E\psi_1^2}{2}\left[\ln \frac{C^2a^2}{r^2} - E'\left(\frac{r^2}{\rho_2^2}\right)\right]$$

$$= \frac{E\psi_1^2}{2}\left[\ln \frac{C^2a^2}{\rho_2} + \gamma_L - \frac{r^2}{\rho_2^2} + \frac{1}{2}\frac{r^4}{\rho_2^4} - \cdots\right] \tag{5.1-32}$$

式中 $E'(x)$ 函数为

$$E'(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-u}}{u}du$$

$\gamma_L = 0.577215$ 是欧拉(Euler)常数. 当 $r = 0$ 时,热振动修正势具有的有限值

$$U_{th}(0) = \frac{E\psi_1^2}{2}\left(\ln \frac{C^2a^2}{\rho_2^2} + \gamma_L\right) \tag{5.1-33}$$

说明当离子横能量高于 $U_{th}(0)$ 时,它能穿到原子列的中心,并且

产生大的角偏转. 图 5.1-10 给出质子同硅晶〈110〉轴向原子列相互作用与温度有关的连续势. 正如理论所预言的, 这些势只有当粒子同原子列的距离在热振动振幅范围内, 即 $r \lesssim \rho_2$, 才与静止晶格的值相差较大. 所以, 一般在考虑沟道效应时不计热振动的修正, 避免了数学上的复杂性.

四 平面沟道

连续模型也可应用用到平面沟道的情形. 不过平面连续势要对原子平面上大量原子的势作平均, 这个连续势是[5]

$$U_p'(y) = Nd_p\int_0^\infty V(\sqrt{r^2+y^2})2\pi r dr \qquad (5.1\text{-}34)$$

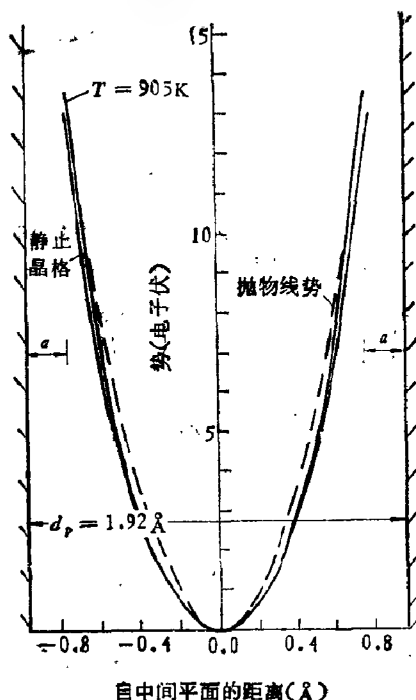


图 5.1-11 质子在 Si(110) 面沟道的连续势能. 计算是根据莫雷尔离子-原子相互作用势 (5.1-3) 式进行的. 静止晶格势的实线是方程 (5.1-36) 给出的 $U_{pM}(y)$. 虚线是谐振子的抛物线型势[12].
注意: 横坐标距离标度是以假想的中间平面开始计算的

式中 Nd_p 是平面上单位面积内原子的平均数目，d_p 是原子平面间距(平均)及 y 是自原子平面的距离．由(5.1-4)式得出 $U_p(y)$ 为

$$U_p(y) = 2\pi Z_1 Z_2 e^2 N d_p[(y^2 + C^2a^2)^{1/2} - y] \quad (5.1-35)$$

显然，在平面条件下讨论连续模型的适用性要比轴向条件下复杂些，因为晶格平面上原子是二维分布的．但也可类似于(5.1-20)式得到

$$U_{pm}(y) = \sum_i U_p(y - y_i) - U_{p\min} \quad (5.1-36)$$

图 5.1-11 给出函数 $U_{pm}(y)$ 的若干例子． 表明沟道粒子横向运动受到平面沟道势的对称性影响，而且,在平面沟道的情况下,粒子运动在横平面内近似为简单的谐振运动．

(5.1-35)式的平面连续势在原子平面（$y = 0$）上是有限的，并且横能量大于势垒能量 $U_p(y_{\min})$ 的离子运动行为类似于随机介质的情形．因此,类似轴沟道情形,平面沟道的临界角可定义为

$$\phi_p = \sqrt{\frac{U_p(y_{\min})}{E}} \quad (5.1-37)$$

$y_{\min} \simeq \rho/\sqrt{2}$ 是一维振动的振幅．根据(5.1-11)式的讨论，同样,我们也可以得到

$$\phi_p = \sqrt{\frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2 N d_p}{E}} \quad (5.1-38)$$

是平面沟道临界角的数量级．实验表明平面沟道临界角大约是轴沟道临界角的三分之一.方程(5.1-37)和(5.1-38)给出临界角同 Z_1，Z_2 和 E 的正确关联,但其绝对值常常同实验符合不太好．

另外，从平面沟道的几何图象，平面沟道的最小产额 $\chi_{p\min}$ 可近似表示成

$$\chi_{p\min} = \frac{2y_{\min}}{d_p} \quad (5.1-39)$$

这个值会大于轴沟道的相应值．像轴沟道情形一样(5.1-28),(5.1-39)式的几何表述比实验的最小产额要低． 由于最小产额值是沟

表 5.1-4　1.0 兆电子伏 He^+ 离子对轴沟道和平面沟道效应的比较

晶　体	$\psi_{1/2}$（轴向）〈100〉	$\psi_{1/2}$（平面）*) (100)	χ_{min}（轴向）〈100〉	χ_{min}（平面）**) (100)
Si	0.63°	0.17°	1.0×10^{-2}	11.0×10^{-2}
Ge	0.80°	0.18°	1.1×10^{-2}	12.0×10^{-2}
W	1.97°	0.38°	0.3×10^{-2}	6.3×10^{-2}

*) Si 和 W 数据从文献 [14] 外推得出；Ge 的数据取自 S. T. Picraux, *et al.*, *phys. Rev.*, **180**, 873(1969).

**) 计算结果是分别从 (5.1-28) 和 (5.1-39) 式得出的.

道效应的量度，这或许是在不太高(兆电子伏以下的能区)的能量范围，平面沟道效应应用较少的原因．但是，近年来，把沟道效应推广到高能区域(几吉电子伏，甚至几百吉电子伏)，高能平面沟道效应预期会有较大的用途[13]．这在第六章最后一节还要讨论．表 5.1-4 比较了 1.0 兆电子伏 He^+ 对轴沟道和平面沟道的临界角和最小产额．

§5.2　沟道的统计平衡理论

离子在晶格中运动的细节是相当复杂的．就是在二维运动的情况下也只能靠计算机模拟来研究(图 5.1-7 所示)[15]．不过计算机解其运动方程非常耗时[16]．然而 林哈德关于横能量壳上统计平衡假设，结合横能量守恒原理提供了求解这些运动平均性质(如反应产额)强有力的理论框架[5]．

一　统计模型的基本考虑

当一束沟道离子进入晶体时，在横动量空间具有某种几率分布．离子穿进晶体一定的深度后，过程在横的相空间中趋向于统计平衡．估计达到这种平衡的深度大约为 1000 原子层，但与入射粒子的能量和靶材料等有关．统计力学处理的方法是时间(深度)平均可用系综平均来代替．对于一个能量守恒的系统来说，空间分布正比于

$$\int \delta(E - E_\perp) d\mathbf{P} \tag{5.2-1}$$

也即是说，在能量守恒时对相空间的动量部分积分．在二维轴沟道的情况下

$$d\mathbf{P} = 2\pi P_\perp dP_\perp = 2\pi M dE_\perp \tag{5.2-2}$$

这样，二维相空间的体积正比于 $dE_\perp$，并且方程 (5.2-1) 的积分是一个常数．一旦在横能量壳上的平衡建立起来，那么在横的相空间中每一点发现离子的几率是一样的．对于轴沟道，在允许面积 $A(E_\perp)$ 内某点 $\mathbf{r}$ 处找到一个横能量是 $E_\perp$ 粒子的几率是

$$P_0(E_\perp, \mathbf{r}) = \begin{cases} \dfrac{1}{A(E_\perp)} & E_\perp \geqslant U(\mathbf{r}) \\ 0 & E_\perp < U(\mathbf{r}) \end{cases} \tag{5.2-3}$$

在连续模型近似下可以认为沟道粒子运动是限制在由若干原子列构成等势剖面图（如图 5.2-1）内，也即是说，横能量为 $E_\perp$ 的粒子总是在区域 $U(\mathbf{r}) \leqslant E_\perp$ 内．因此，(5.2-3) 式中的允许面积 $A(E_\perp)$ 也由等势图来定义．例如，从方程 (5.2-3)，横能量为 $E_\perp$ 的粒子（也即是，1.0 兆电子伏粒子以 0.18° 的角度进入沟道中心）在等势线 $U(r) = 10$ 电子伏所规定的面积内任一点具有相同的几率．

将 (5.2-3) 式的二维几率分布简化成一维情形就得平面沟道

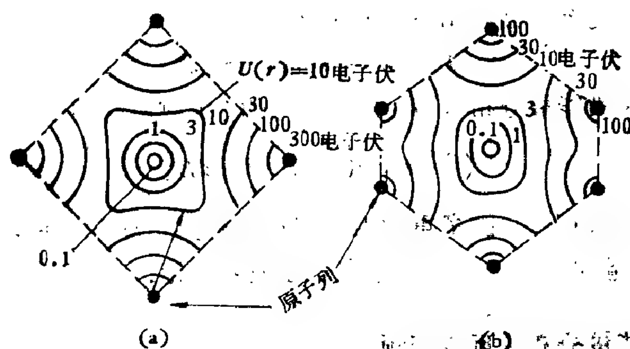


图 5.2-1 (a) He 在 W⟨100⟩轴方向沟道连续势的等势图，连续势是从莫雷尔 (5.1-3) 式推出的．
(b) He 在 Si⟨110⟩ 轴沟道连续势等势图

的描述。在一维情形下

$$dP = dP_{\perp} = \frac{dE_{\perp}}{\sqrt{2M[E_{\perp} - U_P(y)]}} \tag{5.2-4}$$

利用方程 (5.2-1)，就可找到平面沟道的平衡几率分布

$$P_0(E_{\perp}, y) = \begin{cases} \dfrac{C(E_{\perp})}{d_P}\left(\dfrac{E_{\perp}}{E_{\perp} - U_p(y)}\right)^{1/2}, & E_{\perp} \geqslant U_P(y) \\ 0 & E_{\perp} < U_P(y) \end{cases} \tag{5.2-5}$$

式中 $C(E_{\perp})$ 为归一常数．在轴沟道中，在所定义的允许区域内，一个粒子的几率是均匀的，而在平面沟道情况下沟道粒子的几率是不均匀的；在其转折点发现粒子的几率最大．

在横能量壳上，离子轨迹的任何性质的平均行为总是横平面中位置的函数 $f(\mathbf{r})$，对于轴沟道情形，利用 (5.2-3) 式得

$$\begin{aligned} f(E_{\perp}) &= \int P_0(E_{\perp}, \mathbf{r}) f(\mathbf{r}) d^2 r \\ &= \frac{1}{A(E_{\perp})} \int_{U(r)<E_{\perp}} f(\mathbf{r}) d^2 r \end{aligned} \tag{5.2-6}$$

如果只考虑单原子列近似，

$$f(E_{\perp}) = \frac{2}{(r_0^2 - r_{\min}^2)} \int_{r_{\min}}^{r_0} f(r) r dr \tag{5.2-7}$$

因为此时的允许面积由图 5.1-9 给出，即

$$A(E_{\perp}) = \pi(r_0^2 - r_{\min}^2) \tag{5.2-8}$$

如果横能量分布 $g(E_{\perp})$ 是已知的，f 对所有离子求平均，

$$\langle f \rangle = \int g(E_{\perp}) f(E_{\perp}) dE_{\perp} \tag{5.2-9}$$

函数 $g(E_{\perp})$ 因多重散射的存在而随穿透深度变化，也即是说，横能量并不真正守恒．这点后面还要讨论．

二　横能量分布及反应产额

沟道理论的目的之一是估计近碰过程（如核反应）的有效截面．如果一束能量为 E 的离子以同晶轴很小的夹角 ϕ_{in} 打到晶体

上，粒子的运动基本上分为三步：

(i) 穿过晶体表面，使离子束有一定的放横能能量分布 $g(E_{\perp}, \phi_{in})$（一般与入射角 ϕ_{in} 有关系）；

(ii) 在到达晶体内某一深度 z 时，由于多重散射等过程而使横能量分布发生变化 $g(E_{\perp}, z)$（见 § 5）；

(iii) 近碰过程，其反应几率 $\Pi(E_{\perp})$ 是 $E_{\perp}$ 的函数。

从方程 (5.2-9) 得到沟道过程的有效截面 σ_{eff} 是

$$\sigma_{eff}(z, \phi_{in}) = \int dE_{\perp} g(E_{\perp}, \phi_{in}, z) \Pi(E_{\perp}) \sigma \qquad (5.2-10)$$

其中 σ 为随机截面显然比沟道的尺寸要小的多，即 $\sigma \ll d^2$。

为了方便起见，常常考虑的是相对于随机产额的反应产额 χ

$$\chi(z, \phi_{in}) = \int dE_{\perp} g(E_{\perp}, \phi_{in}, z) \Pi(E_{\perp}) \qquad (5.2-11)$$

因此，要决定相对产额，必须知道 g 和 Π。

一个离子在位置 $\mathbf{r}$ 以小角 ϕ_{in} 进入晶体，其横能量为

$$E_{\perp} = U(\mathbf{r}) + E\phi_{in}^2 \qquad (5.2-12)$$

因此，透过表面后的横能量分布由透射因子

$$T(E_{\perp}, \phi_{in}) = \frac{1}{A_0} \int \delta(E_{\perp} - E\phi_{in}^2 - U(\mathbf{r})) d^2 r \qquad (5.2-13)$$

给出，式中 $\delta(x)$ 是狄拉克函数，$A_0 = 1/Nd = \pi r_0^2$。

一般情况下，由于初束分散和表面杂质的多重散射，在入射方向 ϕ_{in} 附近总有一定的角分布 $P(E\phi_{in}^2) dE\phi_{in}^2$，那么，初横能量分布为

$$g(E_{\perp}, \phi_{in}) = \int P(\phi_{in}, E\phi^2) T(E_{\perp}, \phi) dE\phi^2 \qquad (5.2-14)$$

若将 $P(\phi_{in}, E\phi^2)$ 归一化，则

$$\int_0^{\infty} g(E_{\perp}, \phi_{in}) dE_{\perp} = 1 \qquad (5.2-15)$$

从方程 (5.2-13) 得

$$T(E_{\perp}, \phi_{in}) = T(E_{\perp} - E\phi_{in}^2) \qquad (5.2-16)$$

并且，当 $E_{\perp} < E\phi_{in}^2$ 时，

$$T(E_\perp, \phi_{in}) = 0 \tag{5.2-16a}$$

对 $\phi_{in}=0$，类似有

$$P(0, E\phi_{in}^2) = 0; \ E_\perp = 0 \tag{5.2-17}$$

因此，在 $\phi_{in}=0$ 时，(5.2-14) 式变为

$$g(E_\perp, 0) = \int_0^{E_\perp} P(E\phi^2) T(E_\perp - E\phi^2) dE\phi^2 \tag{5.2-18}$$

假如 $P(0)$ 是一定的，

$$g(0, 0) = 0 \tag{5.2-19}$$

若准直后，入射束流遵从高斯分布，其标准偏差为 ϕ_{col}，于是

$$P(E\phi^2) dE\phi^2 = \frac{1}{2E\phi_{col}^2} e^{-\phi^2/2\phi_{col}} dE\phi^2 \tag{5.2-20}$$

如果实验上束流准直很好，那么 ϕ_{col} 很小（$\phi_{col} \ll \phi_1$），并且 T 在 P 的整个范围内变化不大，于是，g 可近似写成

$$\begin{aligned} g(E_\perp, 0) &\simeq T(E_\perp - \overline{E\phi^2}) \int_0^{E_\perp} P(E\phi^2) dE\phi^2 \\ &= T(E_\perp - 2E\phi_{col}^2)(1 - e^{-E_\perp/2E\phi_{col}^2}), \end{aligned} \tag{5.2-21}$$

式中 $\overline{E\phi^2}$ 为 $E\phi^2$ 的平均值.

通常忽略束流分散和多重散射的影响，即得，

$$P(\phi_{in}, E\phi^2) = \delta(E\phi_{in}^2 - E\phi^2) \tag{5.2-22}$$

和

$$g(E_\perp, \phi_{in}) = T(E_\perp, \phi_{in}) \tag{5.2-23}$$

不过，一般情况下，$T(0, 0) \neq 0$.

穿透函数 T 与接受粒子的面积有关，由 (5.2-8) 和 (5.2-13) 式得

$$T(E_\perp, 0) = \frac{d}{dE_\perp} A(E_\perp) \tag{5.2-24}$$

式中

$$A(E_\perp) = \frac{A(E_\perp)}{A_0} \tag{5.2-24a}$$

利用 (5.1-17) 势表达式，在单原子列模型下求出透射因子是

$$T(\varepsilon_\perp, \phi_{in}) = (A-1)\frac{Ae^{(\varepsilon_\perp - \varepsilon_{in})}}{[Ae^{(\varepsilon_\perp - \varepsilon_{in})} - 1]^2} \qquad (5.2\text{-}25)$$

这里 $\varepsilon_\perp$ 为约化横能量

$$\varepsilon_\perp = \frac{2E_\perp}{E\phi_1^2} \qquad (5.2\text{-}26)$$

和

$$\varepsilon_{in} = \frac{2\phi_{in}^2}{\phi_1^2} \qquad (5.2\text{-}26a)$$

这个模型还得到

$$A(\varepsilon_\perp) = \frac{A(e^{\varepsilon_\perp} - 1)}{Ae^{\varepsilon_\perp} - 1} \qquad (5.2\text{-}27)$$

对于多原子列模型[见 (5.1-20 式)], 透射因子必须用数值解. 这里利用 δ 函数的性质,将穿透因子 (5.2-13) 式写成

$$T(E_\perp, 0) = \frac{1}{A_0}\int \frac{\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{min})}{|\nabla U|} d^2r$$

$$= \frac{1}{A_0}\int_c \frac{1}{|\nabla U|_{r=r_{min}}} ds \qquad (5.2\text{-}28)$$

其中 ∇U 是连续势 U 的梯度, ds 是单位晶胞中曲线 c 的线元, 曲线 c 上满足 $U(\mathbf{r}) = E_\perp$. 势 $U(\mathbf{r})$ 是 $\mathbf{r}$ 的周期函数. 因此

(i) 如果利用热运动修正势[如 (5.1-30) 式], $T(E_\perp, 0)$ 在 U 是极小或极大 (相当于 $E_\perp = 0$ 或 $E_\perp = U(0)$) 处应是不连续的.

(ii) 在 U 的鞍点处, $T(E_\perp 0)$ 具有对数奇点.

这样, $T(E_\perp, 0)$ 对所有 $E_\perp > 0$ 都是非零的.实际上,由于 $g(E_\perp)$ 是可积分的, $T(E_\perp, 0)$ 中的对数奇点是观察不到的, 而且, 很快为多重散射和束流分散等因素而达到一个有限的值. 图 5.2-2 是金刚石〈110〉轴向的穿透因子. 其中单原子穿透因子是利用了表 5.1-2 给出有效 A 值计算的, 而多原子列穿透因子是数值计算得到的并且呈现出对数峰值. 图 5.2-2 清楚地表明, 多原子列模型和单原子列近似在高横能量下是差不多的, 但在低横能量下差别相当大. 在多原子列模型中, 从 $E_\perp = 0$ 到第一个峰能

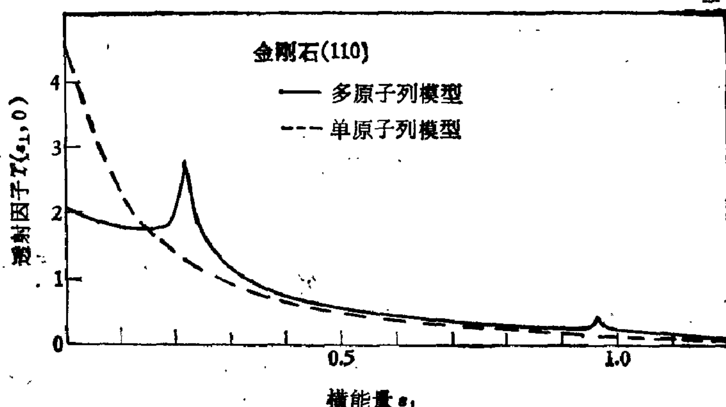


图 5.2-2　根据(5.1-6)标准连续势计算金刚石〈110〉方向单原子列和多原子列穿透因子

量之间的那一部分穿透因子代表着一个晶胞内所捕获的粒子，有时称之为"超沟道"[17].

实验上，常常用截面远小于沟道运动的典型尺寸的核反应来研究沟道效应. 这时，(5.2-10)式中的反应函数是由横平面中散射原子的密度决定的. 这些散射原子通常是晶体原子，即是本身的间隙原子或者是外来原子.

考虑到沟道粒子为晶格沟道中连续势导向而偏离晶轴，因此反应产额是大大地减少了. 只有离子横能量超过某一"临界"横能量，才会跑到随机方向，得到随机反应产额. 因此，简单估计反应函数可用"方阱"近似来描述

$$\Pi(E_\perp)=\begin{cases}1 & E_\perp \geqslant E_\perp^* \\ 0 & E_\perp < E_\perp^*\end{cases} \qquad (5.2-29)$$

"临界"横能量 $E_\perp$ 常常用沟道坑(测量的)的半角来定义，即，$E_\perp^*=E\psi_1$. 更为严格的定义是通过(5.2-11)式模拟测量的半角，这样所得到的值比 $E\psi_{1/2}^2$ 高 10%. 表 5.2-1 给出室温下金刚石多原子列模型的约化临界能量 $\varepsilon_\perp^*$ 值，$\psi_{1/2}$ 是文献[18].

推广到一般情形，散射原子在横平面内有一定的分布，这时反应函数则是由这种分布确定的. 假定 $P(\mathbf{r})d^2r$ 是在 $\mathbf{r}$ 处面积 d^2r

表 5.2-1 室温下金刚石的临界角和临界横能量

晶轴	$\psi_{1/2}$	$\varepsilon_{\perp 1/2}$	$\varepsilon_{\perp}^{*}$
⟨110⟩	0.55°	2.69	2.96
⟨111⟩	0.49°	2.62	2.75
⟨100⟩	0.42°	2.21	2.44

内找到一个原子的几率，那么，从 (5.2-6) 式得到反应函数是

$$\Pi(E_\perp) = \frac{1}{A(E_\perp)} \int_{U(\mathbf{r})<E_\perp} P(\mathbf{r}) d^2 r \qquad (5.2\text{-}30)$$

横平面中晶体原子密度是由热振动分布 (5.1-31) 支配的。如果只考虑单原子列模型，原子集中在一条链上，那么上式的反应函数就变为

$$\Pi(E_\perp) = \frac{1}{A(E_\perp)} \left[e^{-\frac{r_{\min}^2}{\rho_2^2}} - e^{-\frac{r_0^2}{\rho_2^2}} \right] \qquad (5.2\text{-}31)$$

只当横能量 $E_\perp$ 大，$A(E_\perp) \simeq 1$ 时，(5.2-31) 式的反应函数才会很小. 因此，利用 (5.1-24) 式且取 $r_0 \gg \rho_2$，(5.2-31) 式就变成

$$\Pi(\varepsilon_\perp) = \exp\left[-\frac{C^2 a^2}{\rho_2^2} (A e^{\varepsilon_\perp} - 1)^{-1} \right] \qquad (5.2\text{-}32)$$

倘使横平面上 $\mathbf{r}'$ 处的间隙原子密度是 δ 函数，即 $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$，也就是说，它们的热振动可以忽略，那么"方阱"近似可由横平面上这种间隙原子来确定. 利用 (5.2-6) 式则有

$$\Pi_{\text{int}}(E_\perp) = \begin{cases} \dfrac{1}{A(E_\perp)} & E_\perp \geq U(\mathbf{r}') \\ 0 & E_\perp < U(\mathbf{r}') \end{cases} \qquad (5.2\text{-}33)$$

根据 (5.2-30) 和 (5.2-11) 式及单原子列模型(取 $A \to 1$，即 $r_0 = \infty$) 得到最小产额的估计式 $\chi(\psi_{\text{in}} = 0)$：

$$\chi(0) = \pi N d \rho_2^2 \equiv \chi_1 \qquad (5.2\text{-}34a)$$

这与 (5.1-28) 式的结果完全一致。

还有自屏蔽长度 a 之内散射的离子，经多次散射撞到晶格原子的贡献可估计为

$$\chi_2 = \pi N d a^2 \qquad (5.2\text{-}34b)$$

对于表面杂质原子层的影响可以认为遵从卢瑟福散射，这种散射的贡献是

$$\chi_3 = \frac{\pi}{\psi_1^2}\sum_i n_i\left(\frac{z_1 z_j e^2}{E}\right)^2 \tag{5.2-34c}$$

式中 n_i 是表面上第 i 种杂质的面密度，电荷为 $Z_i e$. 关于杂质层的影响后面还要讨论。

利用反应函数（5.2-32）式可近似计算沟道坑的半角 $\psi_{1/2}$[19]. 当 $A=1$ 时，$g(E_\perp)$ 用 $\delta(E_\perp)$ 代替，则 $\psi_{1/2}$ 可由

$$\Pi(E\psi_{1/2}^2) = 0.5 \tag{5.2-35}$$

确定。于是

$$\psi_{1/2} = \sqrt{\frac{U_1(\rho_2\sqrt{\ln 2})}{E}}$$

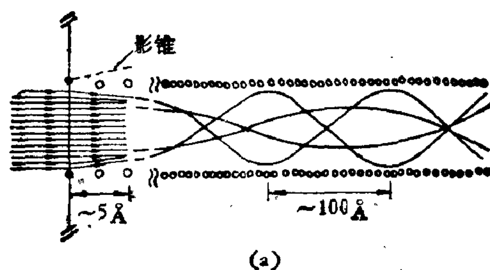
$$= \sqrt{\frac{U_1(1.18x_{rms})}{E}} \tag{5.2-36}$$

式中 x_{rms} 为一个方向上的热振动均方位移。

三 粒子在沟道中通量分布——通量峰效应

当一平行粒子束以 $\psi_{in}=0$ 的角度入射到晶体主轴（或主平面）方向时，靠近原子列(或平面的粒子受表面第一个原子列形成的影锥偏转，经一系列相关碰撞形成沟道轨迹[图 5.2-3(a)]. 粒子的初始位置，横能量不同，构成的轨迹各异. 沟道效应使离子通量在沟道中重新分布. 这些轨迹累计给出沟道中粒子空间密度(通量分布)随穿入深度周期性的变化[图 5.2-3(b)]. 不过，这种周期性振荡特性很快衰减，得到与深度无关的空间分布-平衡状态。

接近固体表面区域沟道粒子通量分布的振荡特性导致近碰几率随深度周期性变化，已为背散射产额能谱的实验所证实. 由于平面沟道的连续势接近谐振势（图 5.1-11)，所以振荡行为比较更有规律，如图 5.2-4 所示，其峰位之间的能量差是大振幅的沟道轨迹半波长的量度（大约为 100 Å）. 轴沟道的结果不像平面沟道那样有规律和明显. 虽然考察这些振荡特性对沟道效应在材料分析



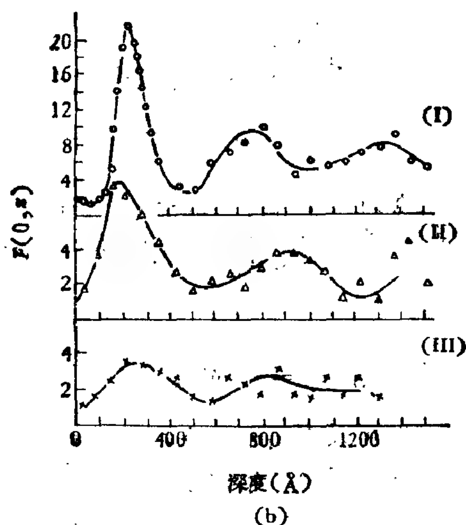


图 5.2-3 (a) 经表面散射进入晶体沟道内的粒子轨迹示意图.
(b) 计算得到的 1 兆电子伏 He^{+} 粒子沿 Cu⟨001⟩ 轴沟道中心的通量分布 $F(0,z)$; (I) 没有多重散射; (II) 0℃, 非弹性多重散射及束流分散±0.06°; (III) 束流分散度为 ±0.23° [D. V. Morgan and D. Van Vliet, *Rad. Eff.*, 12, 203 (1972)]

中的应用作用不大，但对研究沟道过程本身的性质却有重要的意义．当到达深度大约 1000—2000 Å时，通量分布就达稳定值而与深度无关了．我们在这里讨论的是达到稳定状态的通量分布，因为它在确定晶格中杂质原子位置有重要应用（见 § 6.2）．

现在，我们根据横能量分布 $g(E_{\perp}, \phi_{in}, z)$ 或几率分布 $P(E_{\perp}, \mathbf{r})$ 来讨论沟道粒子通量的空间分布．

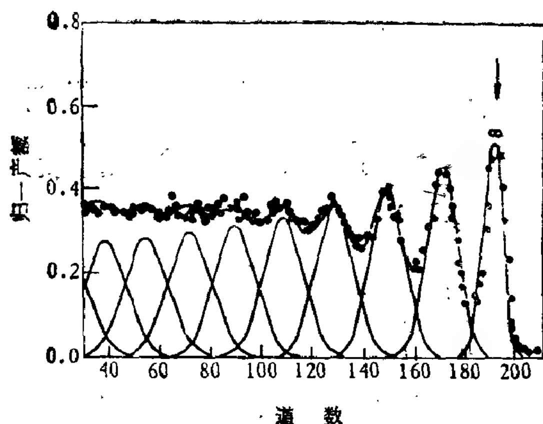


图 5.2-4 1.0 兆电子伏 He^{+} 离子入射的金刚石 (110) 面上背散射离子的归一能谱. 实线是随机模型拟合结果，给出对峰的独立的贡献. 箭头是表面位置[20]

(1) 与沟道方向平行入射 ($\psi = 0$) 的情形

从轴沟道几率密度可以看出通量分布的一般特点. 前面已经说过，人射在沟道不同位置粒子的接受面积对应于其横能量给出的等势图（图 5.2-1)，横能量又由粒子进入沟道的初始位置 $\mathbf{r}$ 决定的. 这意味着那些偏离沟道势极小值的粒子将比进入时接近势极小值的粒子有较大的自由运动的面积(图 5.2-3). 例如，$\psi = 0$，$E\psi^2 = 0$. 恰好在沟道势极小值轴上进入晶体的粒子不会偏离沟道中心，而离势极大值一定距离 $\mathbf{r}$ 进入的离子(即具有一定初始横能量)，则由于势的作用有可能在势的极小值位置上或在 $\mathbf{r}$ 确定的面积内找到(图 5.2-1). 因此，各种粒子贡献之和使通量在沟道中心处出现峰值，如图 5.2-5 所示. 于是，沟道效应使得在晶体外为均匀的束流变为沟道中心具有很尖峰的沟道粒子的通量分布.

由上述的统计模型可知，人射束流到达一定深度，在横能量球壳上得到平衡. 也即是说，在足够深度处（距表面约 1000—2000 Å)，一给定横能量的粒子在一定面积内是均匀分布的，因此，根据

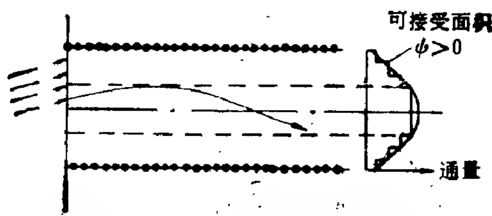


图 5.2-5 均匀粒子束平行进入轴沟道后，粒子通量中心峰产生示意图

林哈德模型[5]，在平衡到达的深度，可以给出通量分布的分析形式. 在轴沟道情形下，由横能量分布函数 $g(E_\perp, \phi_{in}, z)$[(5.2-21)式]得到入射角 ϕ_{in}. 深度 z. 位置为 $\mathbf{r}$ 处归一的粒子通量[21][12]

$$F(\mathbf{r}, z, \phi_{in}) = \int_{U(\mathbf{r})}^{\infty} \frac{g(E_\perp, \phi_{in}, z)}{A(E_\perp)} dE_\perp \qquad (5.2\text{-}37)$$

其中 $A(E_\perp)$ 和前面含义一样是横平面内接受一个横能量 $E_\perp$ 粒子的面积. $U(\mathbf{r})$ 则是 (5.1-20) 或给出的连续势. 方程 (5.2-37) 中的归一化是取 $F(\mathbf{r}, z, \phi_{in}) = 1$ 相应于束流刚好进入晶体前的通量. 显然，如果 $g(E_\perp, z, \phi_{in})$ 在横能量低处有峰(见 § 5.3)，通量分布在沟道中心会出现很尖的峰 (图 5.2-5)，并且这个峰值是随机值的许多倍. 毫无疑问，影响 $g(E_\perp, z, \phi_{in})$ 的因素也都会影响通量峰.

当 $\phi_{in} = 0$ 时，由于入射束是均匀的且忽略多重散射，进入面积元 dA 的粒子数正比于 dA，它们对通量的贡献被 $\frac{1}{A(E_\perp)}$ 权重，$A(E_\perp)$ 代表等势线 $U(E_\perp)$ 内的接受面积(图 5.2-6). 于是，(5.2-37) 式简化为

$$F(\mathbf{r}) = \int_{E_\perp > U(r)} \frac{dA(\mathbf{r}_{in})}{A(E_\perp)} \qquad (5.2\text{-}38)$$

因为这里横能量唯一地由进入沟道离子的初始空间位置所确定，也即是由 $U(r_{in})$ 决定的. 现在，如果计算 $U(r_{in}) > U(r)$ 的 $\mathbf{r}$ 点的通量(即在这样的 $\mathbf{r}$ 值，一个在 r_{in} 入射的离子具有势能 $U(r_{in})$ 大得足以把它带到 r 点)，那么，积分下限是 $A_1(\mathbf{r})$，积分上限则

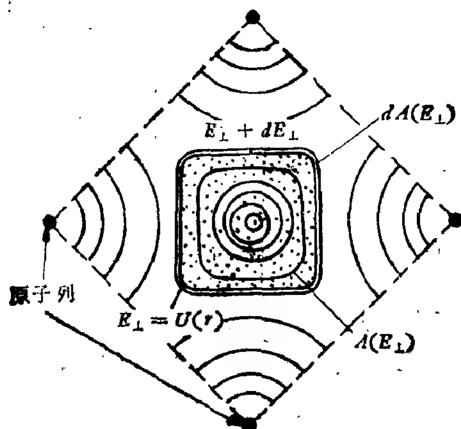


图 5.2-6 体心立方晶体(bcc)中〈100〉沟道内给定横能量 $E_\perp$ 所定义的接受面积 $A(E_\perp)$ 和 $dA(E_\perp)$ 示意图

是整个沟道面积。于是，

$$F(\mathbf{r}) = \ln \frac{A_0}{A_1(\mathbf{r})} \tag{5.2-39}$$

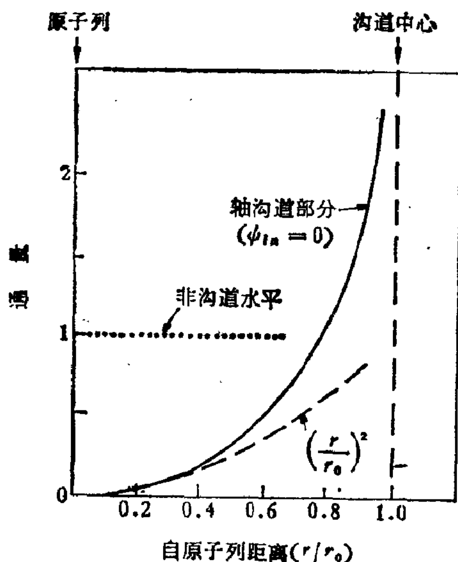
式中 $A_0 = \pi r_0^2$ 为每个沟道面积，$A_1(\mathbf{r})$ 为对应于坐标为 $\mathbf{r}$ 的等势线所包围的面积。当 $U(\mathbf{r}) \to 0$ 时即 $A_1(\mathbf{r}) \to 0$，(5.2-39) 式对数发散，表明在沟道中心处通量为无穷大。实际由于束流总有分散，又有多重散射，故沟道中心处的通量值是有限的。如果等势线具有如图 5.2-1 以原子列为中心的圆柱对称形式，则有

$$F(r) = \int_0^r \frac{2\pi r_{\text{in}} dr_{\text{in}}}{\pi r_0^2 - \pi r_{\text{in}}^2}$$

$$= \ln \frac{r_0^2}{r_0^2 - r^2} \tag{5.2-40}$$

式中 r 是离原子列的距离。图 5.2-7 给出 (5.2-40) 式计算通量的结果。这个通量分布呈现出沟道的显著特性，即在靠近原子列 $(r \to 0)$ 处通量强度趋于零，因而近碰几率也很小。将 (5.2-40) 式展开(当 r 小时)，给出

$$F(r) \approx \frac{r^2}{r_0^2} \tag{5.2-41}$$



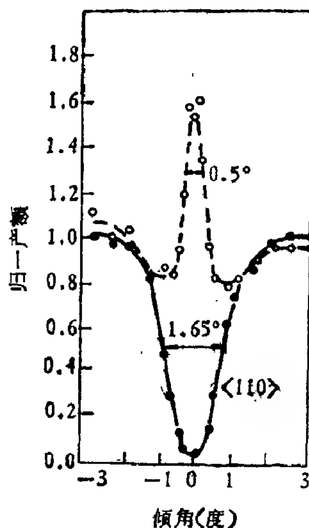


图 5.2-7 在 $\psi_{in}=0$ 入射情形时沟道束的通量分布与原子列距离的关系. 结果是假定统计平衡和圆柱对称的 (5.2-40) 式得到的

图 5.2-8 1.0 兆电子伏 He^+ 入射到 Yb 注入 Si⟨110⟩ 沟道后的近碰几率(归一产额)同入射角之间的关系[22]. 注入剂量为 5×10^{14}Yb/厘米^2(60千电子伏, 450℃). Yb 的高产额第一次显示出通量峰效应

如图 5.2-7 中的虚线所示. 它适于靠近原子列的情形, 且可用这种简单通量分布来估计替代性杂质的散射强度. 显然, 方程 (5.2-40) (图 5.2-7) 给出沟道中心的粒子分布有极大值, 其值远超过非沟道粒子密度的值. 因此, 如果沟道中心附近 ($r\approx r_0$) 有一种间隙性杂质原子, 那么从这种杂质子得到的产额会远大于非沟道的值. 图 5.2-8 示出 1.0 兆电子伏 He^+ 入射到 Yb 原子注入 Si⟨110⟩沟道后的近碰几率同入射角之间关系[22]. 对硅晶格的角扫描给出如图 5.1-3 的沟道特征. 替代性杂质原子的角扫描与主晶格一致. Yb 则不是替代性的杂质, 其所处的位置是粒子通量强度远大于非沟道的方向.

通量峰效应不仅发生在轴沟道中也发生在平面沟道中. 可用平面沟道的平衡几率分布 (5.2-5) 式推出任何给出平面势的通量

分布 $F_p(y)$. 取抛物线势 $U_p \propto (y-\frac{d_p}{2})$（图 5.1-11 中看出它是莫勒尔势的很好近似）推出平面沟道条件下通量分布的分析表达式

$$F_p(y) \simeq \frac{2}{\pi} \ln\left(\sqrt{\frac{1}{(1-2y/d_p)^2}-1}+\frac{1}{1-2y/d_p}\right) \tag{5.2-42}$$

d_p 是原子平面之间的距离. 图 5.2-9 给出其通量分布，与图 5.2-7 的轴沟道通量具有类似的特征，即在原子平面上通量趋于零，而在沟道中心超过 1.

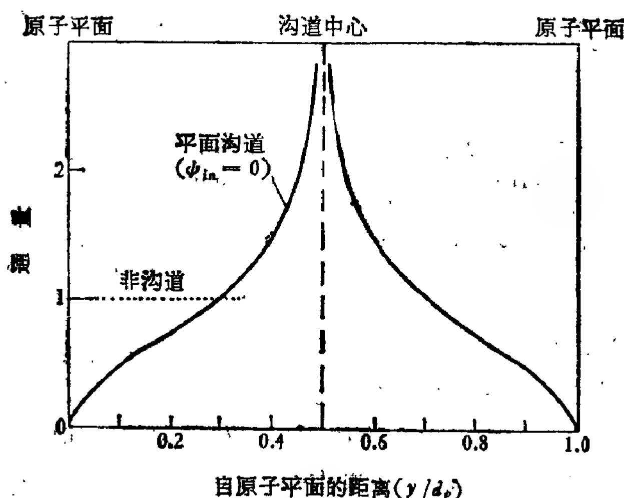


图 5.2-9 当 $\psi_{in}=0$ 时，方程(5.2-42)计算得到的沟道束通量分布同离晶格平面距离的关系

图 5.2-10 和图 5.2-11 比较了钨和硅主轴和主平面沟道方向的通量分布和连续势[23]. 这些结果充分显示了沟道条件对粒子在晶格中空间分布强烈影响. 它使沟道粒子通量在靠近原子列或平面时接近于零. 意味着粒子同晶格原子的一切近碰过程（卢瑟福背散射、核反应、内壳层转换等）均大大地减弱. 相反，在沟道中心处的通量具有很强的极大值，表明处在沟道位置的间隙性杂质原

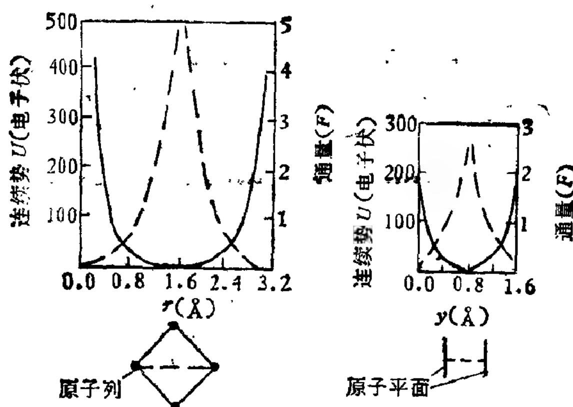


图 5.2-10 He⁺ 入射到钨晶 <100> 和 (100) 沟道方向计算的连续势(莫勒尔势)和通量分布(虚线)

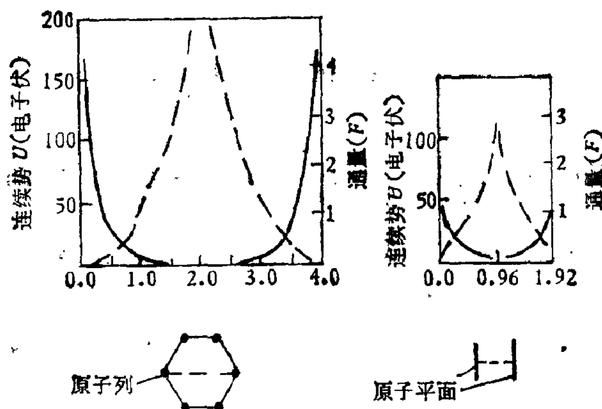


图 5.2-11 He⁺ 入射到硅晶 <110> 轴和 (110) 面沟道方向计算的连续势(莫勒尔势)和通量分布(虚线)

子会得到大的反应信号. 为确定外来原子在晶格中的位置 (特别是间隙原子)提供了方便(图 5.2-8).

(2) 通量分布的角关联

如果把晶体倾斜, 使其同晶轴或主平面方向成一小角 ϕ, 那么, 通量分布会有很大的改变. 角度增加对一给定沟道粒子的影响是增加了其横能量 $E_\perp$ 由 (5.1-19) 式给出,即

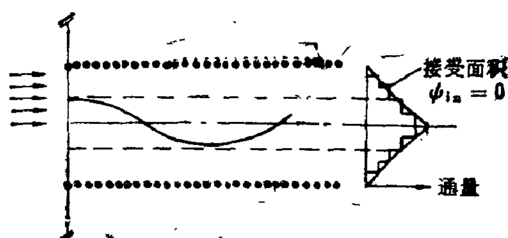


图 5.2-12 $\psi \neq 0$ 时沟道粒子通量分布来源的示意图. 沟道粒子的接受面积是由总的初横能量 $E\psi^2+U(r_{in})$ 确定的

$$E_{\perp}=U(\mathbf{r}_{in})+E\psi^2 \tag{5.2-43}$$

$\mathbf{r}_{in}$ 是粒子进入沟道的初始位置. 它的作用是使粒子趋向较高的等势面(图 5.2-6), 使通量分布的面积加大(相对于原来没有倾角的情况). 用上述 $\psi=0$ 情形相同的方法来求通量密度,不同之点是现在要增加一定沟道粒子的允许面积.

对于轴沟道,等势线构成的面积 $A(U(\mathbf{r}_{in})+E\psi^2)=A(E_{\perp})$, 则有

$$F(r,\psi)=\int\frac{dA(r_{in})}{A(E_{\perp})},\quad U(\mathbf{r}_{in})+E\psi^2\geqslant U(\mathbf{r}) \tag{5.2-44}$$

这同 $\psi=0$ 的 (5.2-38) 式类似. 图 5.2-12 给出 (5.2-44) 式取和的示意图. 粒子布居的面积是由横能量 (5.2-43) 式定义的. 比较图 5.2-12 和图 5.2-5 可以看出, $\psi\neq 0$ 的通量分布比 $\psi=0$ 的通量分布要宽得多.

用连续势的一个具体形式可以求出 (5.2-44) 式的通量分布. 假定等势线符合圆柱对称 (图 5.2-1) 和标准势近似 (5.1-13) 式, 则可得到通量分布角关联的近似结果

$$\begin{aligned}F(r,\psi)&=e^{2\psi^2/\psi_1^2}\ln\frac{r_0^2}{r_0^2-r^2},\quad \psi\leqslant\psi_m\\ F(r,\psi)&=e^{2\psi^2/\psi_1^2}\ln\frac{1}{1-e^{2\psi^2/\psi_1}},\quad \psi\geqslant\psi_m\end{aligned} \tag{5.2-45}$$

式中

$$\psi_1=\sqrt{\frac{2z_1z_2e^2}{Ed}}$$

$$\phi_m = \phi_1 \sqrt{\ln \frac{r_0}{r}} \tag{5.2-45a}$$

于是，面积为

$$A(E\phi^2 + U(r_{1n})) = \pi r_0^2 - \pi r_1^2 \tag{5.2-46}$$

其中 $U(r_1) = E\phi^2 + U(r_{1n})$. 因此，随着角度的增加，沟道中心处的通量峰很快展宽，大小很快减弱(图 5.2-13)。

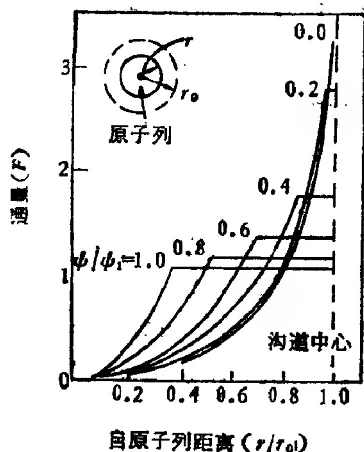
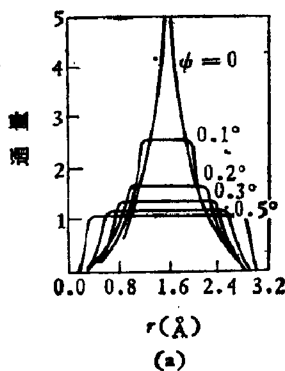


图 5.2-13 轴沟道通量与入射角ϕ的关系。假定满足对称性及标准势(5.1-13)式，即 $r/Ca<1$ 的标准势

图 5.2-14 给出用莫勒尔势和方程(5.2-44)计算 1 兆电子伏 He 入射 $W\langle 100\rangle$ 轴和(100)面沟道中通量分布与入射角 ϕ 的关系[24]。其中轴沟道[图 5.2-14(a)]类似于图 5.2-13 的通量分布。而在平面沟道中，除了通量分布展宽外，在那些粒子进入沟道中心的拐点处分布也出现峰值，这是由于势阱中一维运动的结果。

最后，说明一下，借助通量峰也可以给出一个反应的相对产额，



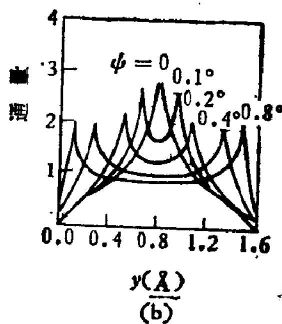


图 5.2-14 1 兆电子伏 He^+ 入射到 $W\langle 100\rangle$ 轴(a)和(100)面(b)沟道方向计算的通量与角 ϕ 的关系

$$\chi(z,\psi_{in}) = \int F(\mathbf{r},z,\psi_{in})P(\mathbf{r})d^2r \qquad (5.2\text{-}47)$$

其中 $P(\mathbf{r})d^2r$ 是原子在 r 处 d^2r 中的几率。 利用 (5.2-27) 式、(5.2-3) 式和 (5.2-33) 式，可看出 (5.2-47) 式同 (5.2-11) 式一致。

四 计算机模拟和平衡连续模型的局限性

同精密的理论和计算机模拟结果相比较，发现平衡连续模型存在着局限性。 林哈德最小产额的表达式 (5.2-28) 式或者 (5.2—34) 式的 ($\chi_1 + \chi_2$) 所给出的结果同实验有一定的偏离 (表 5.1-3)。安德逊和拉格斯哥德 (Laegsgård) 对一系列晶体研究表明，(5.2-36) 式估计的临界角也要高出 20%[24]。

巴锐托 (Barrett) 用计算模拟对沟道效应进行了广泛的研究[6][15]，所得到的最小产额 [(5.1-29) 式] 和半角与许多晶体的实验结果较为符合(表 5.1-3)。其最小产额可写成

$$\chi_{min} = \chi_{1B} + \chi_{2B} \qquad (5.2\text{-}48)$$

其中，

$$\chi_{1B} = c_1 Nd\pi\rho_2^2(1-\xi^{-2})^{1/2}$$

$\xi = \dfrac{1.55\rho_2}{\psi_c^B d}$ [(5.1-29) 式]通常在兆电子伏能区很小，而且

$$\chi_{2B} = c_2 Nd\pi a^2$$

这里 c_1 和 c_2 是拟合参数，它们依赖于束流的分散度。当束流不分散时，巴锐托找到

$$c_1 = 3.0 \pm 0.2$$

$$c_2 = 0.2 \pm 0.1$$

在兆电子伏区域，(5.2-48) 式变为

$$\chi_{min} = Nd\pi(c_1\rho_2^2 + c_2 a^2) \qquad (5.2\text{-}49)$$

图 5.2-15 是计算 3 兆电子伏质子入射到钨晶上最小产额同温度的关系。

巴锐托还计算了一系列不同情况的沟道坑的半角 $\psi_{\frac{1}{2}}$(图 5.1-3)。如图 5.2-16 示出轴向和平面沟道下半角 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 同温度和能量的

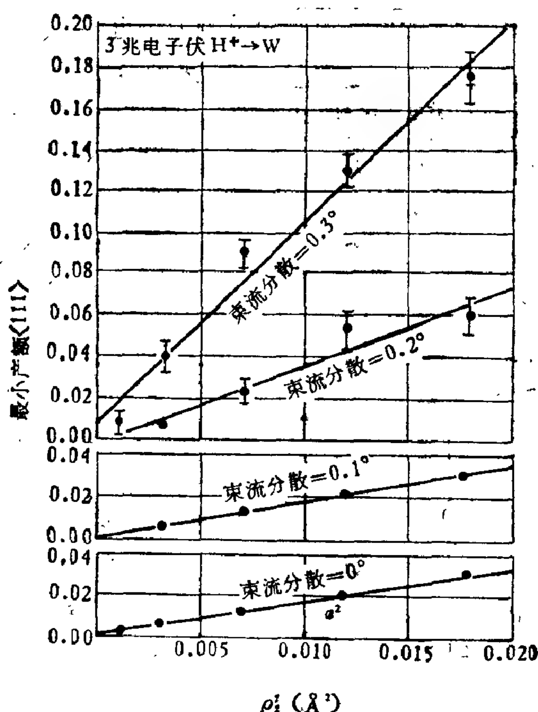


图 5.2-15　钨中沟道最小产额同热振动振幅之间的关系[6]

关系，得到

$$\psi_{\frac{1}{2}} = k\{U_1(mx_{\text{rms}})/E\}^{1/2} \qquad (5.2\text{-}50)$$

k 和 m 是可调的拟合参数．对质子而言，拟合最好时的参数 $k=0.80$ 和 $m=1.2$．显然，不同的材料不同的入射粒子，k 和 m 略有不同[见 (5.2-36) 式]．(5.2-50) 式和 (5.2-36) 式的连续模型结果只相差一个 k 因子．

平衡模型计算和计算机模拟之差别的原因是具有一定横能量的离子在横平面中有聚焦效应，即是离子与一个原子列碰撞后再同相邻原子列近碰而聚焦[25]．这些离子能量的数量级是 $E\psi_1^2$，并且最靠近原子列周围的离子会增强，从而使产额增加，使临界角减小，造成上述的统计模型失效．如果把反应函数加以修正来考虑这种聚焦效应，所得到的表达式必须进行数值解，只能给出近似描

述。因此，反应函数还是采用最简单的方阱近似［(5.2-29)式］，来拟合实验测量的临界角。这样得到的最小产额与(5.2-50)式相符合。

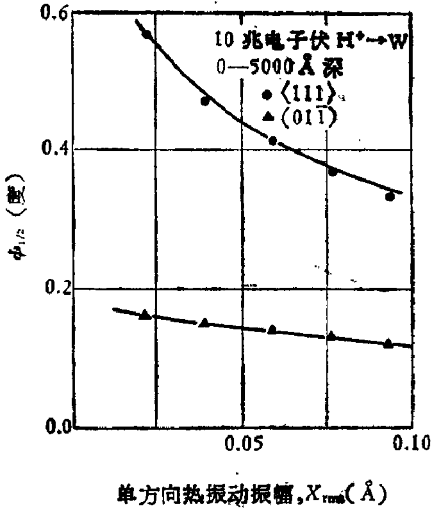


图 5.2-16　轴向和平面沟道半角 $\psi_{1/2}$ 与热振动振幅之间的关系[6]

统计模型的另一个问题是在沟道坑上没有如图 5.1-3 上所示的"肩膀"。用"半平面模型"可以得到这个超过随机方向产额的肩膀[26]。它是把连续模型加以修改，假定在原子列上两相邻原子间距离之半的平面上的横能量是守恒的，得到离子从原子列上发射产额同发射角之间的关系，并且，在 $\frac{\rho_2}{\psi_1 d}>$ 时，就是林哈德连续模型的结果。图 5.2-17 示出林哈德连续势模型。半平面模型以及计算机模拟得到原子列发射粒子的角分布 $\Pi(\psi_e)$。

然而，测量产额角分布时出现的肩膀(图 5.1-3)和从半平面模型所得到的"肩膀"不完全一回事：产额角关联出现的肩膀是从轴向沟道向平面沟道过渡时出现的复杂效应的结果。虽然在平面沟道中可用平面连续势模型［(5.1-34)式］来表示，但不能描写从轴沟道向平面沟道的过渡，因为平衡连续模型不允许在轴沟道中达到统计平衡时夹杂着平面沟道的影响。

最后，平衡连续模型不能描述平衡到达之前的任何深度的状态。实验上(图 5.2-4)和计算机模拟［图 5.2-3(b)］中都发现通量在 2000 Å 以内的表层中有涨落。图 5.2-18 给出巴锐托用蒙托-卡罗法进行计算机模拟，最小产额(近碰几率)随深度的关系，呈振荡行为。这是因为粒子从沟道的一边向另一边规则运动造成的。若

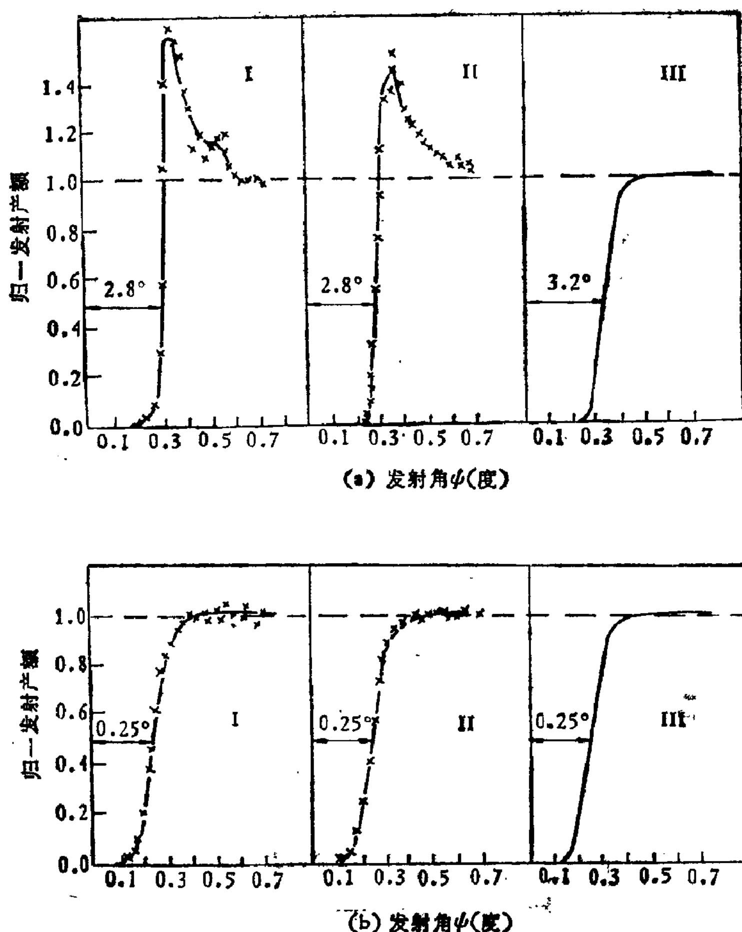
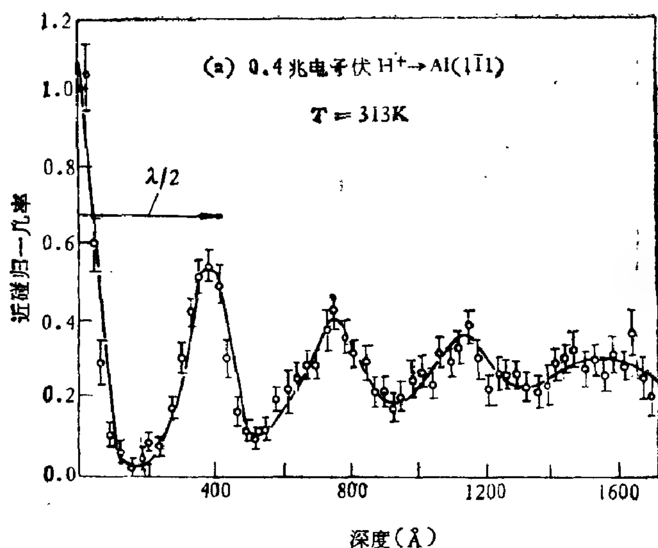


图 5.2-17 原子列上发射离子角分布 $\Pi(\psi_e)$: (I) 计算机模拟; (II) 半平面模型; (III) 林哈德连续势. (a) 温度为 0K 时钨中 <001> 原子列发射 400 千电子伏质子; (b) 300K 时硅<101>原子列发射 7 兆电子伏质子[37]

沟道离子路径的波长为 λ，那么沟道中间的通量峰值是在 $\frac{\lambda}{4}$ 处.

前面说明，由于沟道粒子容易向邻近沟道移动(图 5.1-7)，因此，轴沟道的振荡特性 [图 5.2-18(b)] 没有平面沟道有规律. 当然，在



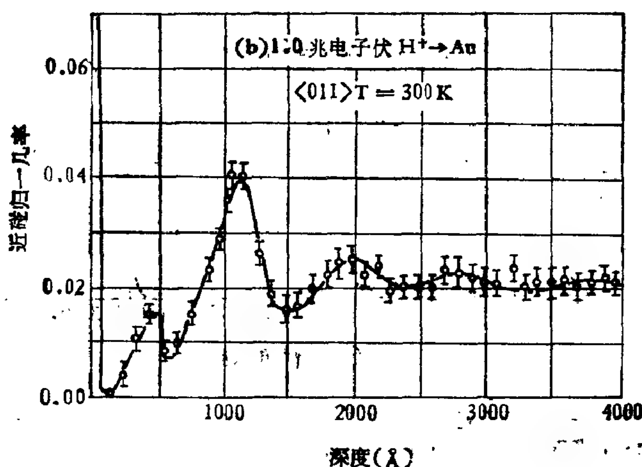


图 5.2-18　近碰几率同深度的关系：(a)面沟道：0.4 兆电子伏 H^+ 入射到 Al(1$\bar{1}$1) 面上，(b) 轴沟道，10 兆电子伏 H^+ 入射到 Au〈011〉轴沟道上[6]

一般实验深度分辨率不大好的情况下不易鉴别出这些涨落．故有时认为统计平衡模型是对深度求平均．不过，有些情况，例如研究注入在外表的外来原子在晶格中位置，振荡效应则是主要的．

§ 5.3 沟道离子的能量损失

第二章中我们已经讨论过入射离子在原子分布为无序的物质(包括晶体的非沟道方向)中运动时的能量损失. 主要是两种机理：一是同靶原子重核发生弹性散射，二是使原子的电子激发. 在几十万电子伏特到几兆电子伏特的能量范围内，后者超过前者的上千倍(图 2.1-1). 入射粒子的能量再低，则核阻止变为主要的；能量再高，要考虑相对论效应和核反应.

在沟道条件下，由于入射离子被晶格原子列(或原子平面)的导向而偏离原子列(或原子平面)的区域，因此，同靶原子核发生弹性碰撞(§ 2.2 核阻止)的几率大大地减少了. 电子的能量损失虽然不是近碰过程但也受到沟道的影响. 根据图 2.6-1 所示的原理，考察 7.0 兆电子伏 He^+ 离子束穿过 11.2 微米厚的 Si⟨110⟩、Si⟨111⟩ 轴向和 Si(111) 面向随机方向上的透射能谱(图 5.3-1). 显

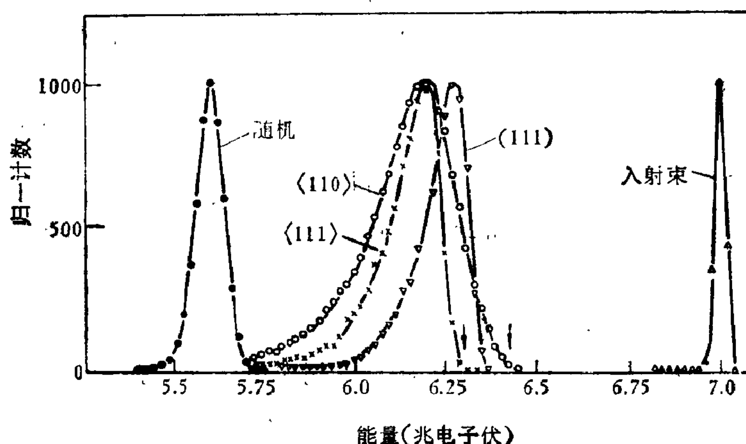


图 5.3-1 7 兆电子伏 He^+ 入射到 11.2 微米厚的 Si⟨110⟩ 和 Si⟨111⟩ 轴向和随机方向上的透射能谱. 图中还有(111)面的透射谱*)

*) 参见 J. U. Andersen and J. A. Davies, *Nucl. Instr. Meth.*, **132**, 179 (1976).

然沿着沟道方向人射的氯离子能量损失小得多。

正如我们在第二章中讨论过的这两种能量损失过程，从经典力学的观点看，它对应着大碰撞参数，即远距离同电子碰撞，和小碰撞参数，即弹性近碰，此时束缚效应是很小的。从量子力学观点看，它们分别对应于小的和大的动量转移。如果一个离子轨道是在电子轨道之外，则高动量转移截面可以忽略，且离子的能量损失很小。

鉴于沟道粒子的能量损失主要是电子阻止，而且低能下电子阻止可用修正的费尔索夫模型[(2.3-38)式]描述，图 2.3-4 已经给出了同实验较为符合的结果[28]。所以，本节主要讨论高速(兆电子伏)沟道粒子的电子阻止问题，并同实验结果相比较，指出尚待解决的问题[29]。

一 玻姆-派恩斯 (Bohm-Pines) 模型

计算沟道粒子所受的阻止有两种途径：第一，把价电子同芯电子分开处理，有时甚至把芯电子的影响忽略[11,30]，这在能量不高的情况是可以的。用绝热近似可以估计特定电子壳层被激发的最大距离，

$$b_{\max} = \frac{\hbar v}{U_0} \qquad (5.3\text{-}1)$$

式中 U_0 为束缚能，v 为粒子的速度。也有人把芯电子考虑进去[31]。第二，同时考虑所有的电子，但把价电子看成一种均匀的电子气[32,33]。

这里我们利用电子气体模型（第二章 § 2.3）以及玻姆-派恩斯把共振和单粒子激发分开的图象来讨论电子能量损失[29]。派恩斯等人把价电子看成是等离子体[34,35]。等离子体激元谱线分成：能量损失主要是由等离子体振荡和主要是由单粒子激发所形成的单粒子谱。共振能量损失应是所有的价电子，而单粒子能量损失则与局部电子密度有关。所以，价电子引起能量损失可表示成[11]

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{\text{val}} = \frac{4\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} N[Z_{\text{val}} L_k + Z_{\text{loc}} L_e] \qquad (5.3\text{-}2)$$

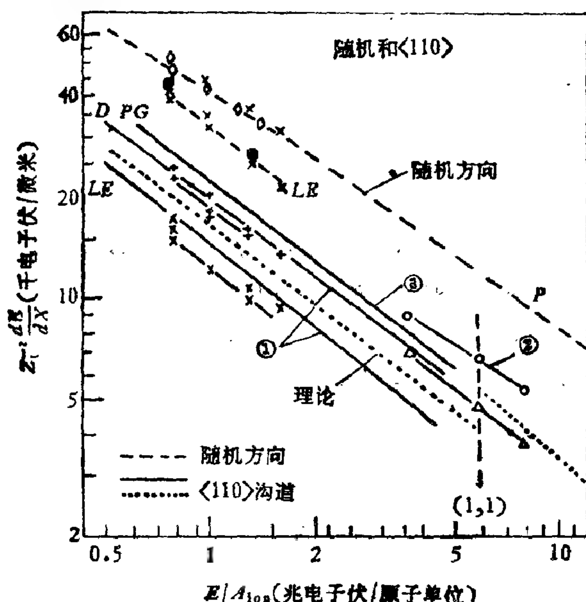


图 5.3-2 Si ⟨110⟩ 沟道中质子的能量损失[39]. 除文中说明过的 P 和 LE 意义外，PG 是高斯分布拟合峰值. 且 + 是 P 数据. × 是 LE 数据. 点线(……)理论计算，－－－虚线为随机方向，垂直虚线表示 (1, 1) 壳层的芯电子的贡献. 实线数据及编号分别为参考数据来源：(1) F. H. Eisen, et al., *Rad. Eff.*, **13**, 93(1972)(2) G. J. Clark, et al., in Atomic Collision Phenomena in solids, North Holland, Amsterdam, P389 (1970) (3) G. Della Mea, et al., *Rad. Eff.*, **13**, 115(1972)

其中

$$L_R = \ln \frac{v}{v_F}$$
$$L_S = \ln \frac{2m_e v v_F}{\hbar \omega_P} \tag{5.3-3}$$

L_R 和 L_S 分别表示等离子体共振和单粒子激发能量损失的对数项。Z_{val} 是价电子数，NZ_{Loc} 是离子经过路径上局部电子密度，Z 为入射离子的原子序数，m_e 是电子质量，v 是入射粒子速度和 v_F 为费米速度而 ω_P 是电子气的等离子体频率。如果从偶极近似下对一谐振束缚电荷的能量损失的已知结果来考虑芯电子的贡

献[36]，则可得到单次碰撞的能量损失

$$\Delta E(b)=\frac{2}{m_e}\left(\frac{Z_1e^2}{v^2}\,\omega\right)^2\left[K_0^2\left(\frac{\omega b}{v}\right)+K_1^2\left(\frac{\omega b}{v}\right)\right]\quad(5.3\text{-}4)$$

$$\simeq\frac{2Z_1e^4}{m_ev^2b},\qquad\frac{\omega b}{v}\ll 1\quad(5.3\text{-}4a)$$

式中ω是电子频率，b为碰撞参数，K_0和K_1分别是零阶和1阶第二类修正的贝塞耳函数．如果采用莫雷尔势计算局部电子密度，(5.3-4)式同质子在硅中的能量损失的实验结果符合很好，如图5.3-2所示．实验数据是用薄晶透射谱中得到的．理论曲线(点线)夹在峰值(P表示)和外推前沿数值(LE)之间．

这个理论虽然在一些情况下给出较好的结果，但图象过去简单．因为单粒子碰撞参数的范围从$b_{\min}=\frac{1}{k_{\max}}=\frac{\hbar}{2m_ev}$推展到$b_c=\frac{1}{k_c}=\frac{v_F}{\omega_P}$．$b_c$的数量级和沟道大小差不多，因此局部电子密度$NZ_{\text{Loc}}$实际上应对沟道面积作平均．而且，沟道对等离子体激元的损失有影响．其外，在沟道中心处用托马斯-费米(或莫勒尔近似势)模型求局部电子密度也会产生较大的偏差．

二 空间周期性电子气中的能量损失

如果把价电子看成是空间周期性电子气并用随机相近似中的介电常数来计算阻尼能力，得到[38]

$$-\frac{dE}{dx}(r)=\frac{z_1^2e^2}{\pi^2v}\int\frac{d^3\mathbf{k}}{k^2}\int_{-\infty}^{\infty}\omega d\omega\,\mathrm{Im}\,[K(\mathbf{k},\omega,\mathbf{r})]\cdot\delta(\omega-\mathbf{k}\cdot\mathbf{v})\quad(5.3\text{-}5)$$

式中$\mathbf{r}$是沟道中横平面内离子轨道位置，响应函数K在平移不变的情况下变成$K=\frac{1}{\varepsilon(k,\omega)}$．响应函数可用傅里叶级数展开

$$K(\mathbf{k},\omega,\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{G}}K(\mathbf{k},\omega,\mathbf{G})e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}\quad(5.3\text{-}6)$$

式中取和号是对所有垂直于沟道的倒易晶格矢量$\mathbf{G}$取和，而其它

方向的倒易晶格矢量均因沿沟道取平均而相消．于是

$$
\begin{aligned}
f(\mathbf{r}) &= \frac{1}{d}\int_{-\infty}^{\infty} f(\mathbf{r}, z)dz \\
&= \frac{1}{d}\int_{-\infty}^{\infty}\sum_{\mathbf{G},G_z} f(\mathbf{G}, G_z)e^{i(\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}+G_z z)}dz \\
&= \frac{1}{d}\sum_{\mathbf{G},G_z} f(\mathbf{G}, G_z)\delta(G_z)e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \\
&= \sum_{\mathbf{G}} f(\mathbf{G}, 0)e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}
\end{aligned}
$$

在弱束缚近似下[39]，响应函数是

$$
K(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{G}) = \delta_{\mathbf{G},\mathbf{O}}\frac{1}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega, 0)} - (1-\delta_{\mathbf{G},\mathbf{O}})\cdot\frac{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{G})}{\varepsilon(\mathbf{k}, \omega, 0)} \tag{5.3-7}
$$

式中 $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{G})$ 是周期性介电函数 $\varepsilon(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{r})$ 的傅里叶分量，不过，这时仅考虑了局域场效应．

这个理论可以直接得到与路经有关的沟道离子的能量损失，并没有考虑区分共振和单粒子激发，已得到好的结果[30]．然而，实际应用时涉及相当复杂的数值计算，需要计算响应函数K和(5.3-5)式中的积分．因此，我们运用取和规则来求高速下方程(5.3-5)式的近似解．

假定电子气体的密度是 n_e，方程(5.3-5)式可以写成如下形式

$$
-\frac{dE}{dx}(\mathbf{r}) = \frac{4z_1^2e^4}{m_e v}\frac{n_e}{\pi\omega_p^2}\sum e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}I(\mathbf{G}) \tag{5.3-8}
$$

且

$$
I(\mathbf{G}) = \int_0^{\infty}\frac{d^3\mathbf{k}}{k^2}\int\omega d\omega\,\mathrm{Im}\,[K(\mathbf{k}, \omega, \mathbf{G})]\delta(\omega-\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}) \tag{5.3-8a}
$$

$$
\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi n_e e^2}{m_e}} \tag{5.3-8b}
$$

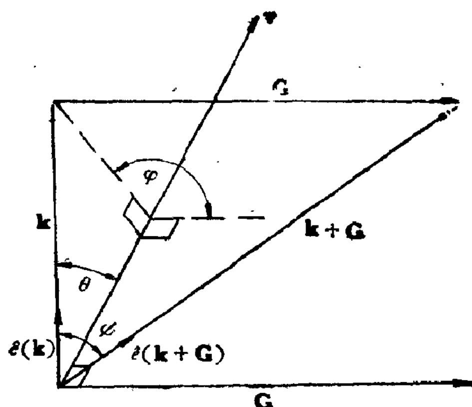


图 5.3-3 方程(5.3-10)中各参量的方位示意图

式中 $K(\mathbf{k},\omega,\mathbf{G})$ 由(5.3-7)式给出。

在速度较高的区域运用取和规则来近似求积分 $I(G)$。约翰逊(Johnson)[40] 考察了非金属的介电响应得到

$$\lim_{\omega\to\infty}\varepsilon(\mathbf{k},\omega,\mathbf{G})=\delta_{0,\mathbf{G}}-\frac{\omega_P^2}{\omega^2}F_v'(\mathbf{G})\hat{e}(\mathbf{k})\cdot\hat{e}(\mathbf{k}+\mathbf{G})$$

其中 $F_v'(\mathbf{G})$ 是价电子X射线结构因子，归一化时 $F_v'(0)=1$，$\hat{e}(\mathbf{k})$ 是沿着 $\mathbf{k}$ 方向的单位矢量。于是，得到取和规则

$$\int_0^\infty\omega\,\mathrm{Im}\,[\varepsilon(\mathbf{k},\omega,\mathbf{G})]d\omega=-\frac{\pi}{2}\omega_P^2F_V'(\mathbf{G})\hat{e}(\mathbf{k})\cdot\hat{e}(\mathbf{k}+\mathbf{G})$$

同样，从

$$\lim_{\omega\to\infty}K(\mathbf{k},\omega,\mathbf{G})=\delta_{0,\mathbf{G}}+\frac{\omega_P^2}{\omega^2}F_V'(\mathbf{G})\hat{e}(\mathbf{k})\cdot\hat{e}(\mathbf{k}+\mathbf{G})$$

也可推出取和规则

$$\int_0^\infty\omega\,\mathrm{Im}\,[K(\mathbf{k},\omega,\mathbf{G})]d\omega=\frac{\pi}{2}\omega_P^2F_V'(G)\hat{e}(\mathbf{k})\cdot\hat{e}(\mathbf{k}+\mathbf{G})\tag{5.3-9}$$

由于只需考虑既垂直于沟道又垂直于速度矢量 $\mathbf{v}$ 的倒易晶格矢量 $\mathbf{G}$，所以

$$\cos\psi=\hat{e}(\mathbf{k})\cdot\hat{e}(\mathbf{k}+\mathbf{G})$$

可由图 5.3-3 给出，即

$$\cos\phi = \frac{k^2 + kG\cos\varphi\sin\theta}{k\sqrt{k^2 + G^2 + 2kG\cos\varphi\sin\theta}} \tag{5.3-10}$$

在各向同性系统中，K 与 θ 无关。在周期性价电子气体中，系统偏离各向同性不太大，故在一级近似下可略去 K 随 θ 的变化，对 θ 积分后得

$$I(\mathbf{G}) \simeq \frac{1}{v}\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{dk\,d\varphi}{k}\int_0^{kv}\omega d\omega\,\mathrm{Im}[K(\mathbf{k},\omega,\mathbf{G})] \tag{5.3-11}$$

当 $\mathbf{k}$ 大时，$\mathbf{k}$ 近似平行于 $\mathbf{v}$，并且 $\sin\theta \simeq 0$，则 (5.3-10) 式变成

$$\cos\phi = \frac{k}{\sqrt{k^2 + G^2}}$$

对 φ 积分得

$$\overline{\cos\phi} = \frac{2\pi k}{\sqrt{k^2 + G^2}} \xrightarrow{k\to\infty} 2\pi$$

对小的 $\mathbf{k}$，$\mathbf{k}$ 近似垂直于 $\mathbf{v}$，并且 $\sin\theta \simeq 1$，于是有

$$\cos\phi = \frac{k + G\cos\varphi}{\sqrt{k^2 + G^2 + 2kG\cos\varphi}}$$

对 φ 积分并取 $k/G \leqslant 1$ 时得

$$\overline{\cos\phi} = 4\left[\frac{k}{G}K\left(\frac{k}{G}\right) + \frac{G}{k}K\left(\frac{k}{G}\right) - E\left(\frac{k}{G}\right)\right]$$

$$\simeq \pi\frac{k}{4}, \qquad k \to 0$$

式中 K 和 E 为椭圆函数。选择一个简单的函数把高 $\mathbf{k}$ 和低 $\mathbf{k}$ 区域连接起来，即是

$$\overline{\cos\phi} = \frac{2\pi k}{\sqrt{k^2 + 4G^2}}.$$

采用 (5.3-9) 式的取和规则，并且对均匀电子气体的积分限可以交换，则 (5.3-11) 式变成

$$I(\mathbf{G}) = \frac{\pi^2}{v}\omega_P^2\int_{k_{\min}}^{k_{\max}}\frac{dk}{\sqrt{k^2 + 4G^2}}F'_v(\mathbf{G})$$

其中 $k_{\min}$ 和 $k_{\max}$ 表示取这两个动量为间隔的电子气体隙，

$$k_{\min} = \frac{\sqrt{\omega_P^2 + E_g^2/\hbar^2}}{v};\quad k_{\max} = \frac{2m_e v}{\hbar}.$$

因此，阻止能力由下式给出

$$-\frac{dE}{dx}(r) = \frac{4\pi z_1^2 e^4}{m_e v^2} n_e \sum_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} F_v'(\mathbf{G})$$

$$\cdot \ln \frac{2m_e\left(v^2 + \sqrt{v^4 + \frac{G^2 v^2 k^2}{m_e^2}}\right)}{\hbar\left(\omega_g + \sqrt{\omega_g^2 + 4G^2v^2}\right)} \quad (5.3\text{-}12)$$

式中 $\omega_g^2 = \omega_P^2 + E_g^2/\hbar^2$.

如果一个间隙中的电子气体 k_C 是确定的，则近碰和远碰可以分开，也即

$$L_R = \sum_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} F_v'(\mathbf{G}) \ln \frac{k_C + \sqrt{k_C^2 + 4G^2}}{k_{\min} + \sqrt{k_{\min}^2 + 4G^2}}$$

$$L_S = \sum_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} F_v'(\mathbf{G}) \ln \frac{k_{\max} + \sqrt{k_{\max}^2 + 4G^2}}{k_C + \sqrt{k_C^2 + 4G^2}} \quad (5.3\text{-}13)$$

表 5.3-1 给出 (5.3-12) 式近似理论得到的结果并同德赛乌(Desalvo) 和罗撒 (Rosa)[30] 数值计算的结果加以比较(注意：计算时取质子在硅中的运动). 可以看出，结果相当满意. 在 2 兆电子伏质

表 5.3-1 数值计算和方程 (5.3-12) 式计算硅中阻尼数傅里叶分量 $L = L_R + L_S$

质子能量(千电子伏)	G	$L^{*)}$	$L^{**)}$
100	(000)	2.373	2.511
100	(111)	0.355	0.359
100	(222)	0.055	0.042
2000	(000)	5.622	5.500
2000	(111)	0.906	0.819
2000	(222)	0.139	0.117

*) 文献 [30]

**) 方程 (5.3-12) 的计算值.

子能量时，大约有 5% 的偏差。

方程 (5.3-12) 得到一些有意义的结果。对单位晶胞取平均可确定随机能量损失，只要把 $G=0$ 的项除去即得

$$-\left.\frac{dE}{dx}\right|_{\text{ram}}=\frac{4\pi z_1^2 e^4}{m_e v^2} n_e \ln \frac{2m_e v^2}{\hbar\omega_g} \tag{5.3-14}$$

这就是一个间隙内的电子气体的能量损失-贝特公式 (2.3-30)。当 $mv \gg G$ 时，(5.3-12) 式简化为

$$-\frac{dE}{dx}(r)=\frac{4\pi z_1^2 e^4}{m_e v} n_e\left[\ln \frac{2m_e v^2}{\hbar\omega_g}+\sum_{G\neq 0} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}\right.$$

$$\left.\cdot F'_v(\mathbf{G}) \ln \frac{2m_e v}{\hbar G}\right] \tag{5.3-15}$$

这同艾斯本逊 (Esbensen) 等人[33]的结果完全类似。若令 $n_e=Z_v N$，(5.3-15) 式重新安排后可得

$$L=Z_v \ln \frac{v}{v_F}+\sum_{G} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \ln \frac{2m_e v v_F}{\hbar\omega_g} F_v(\mathbf{G})$$

$$+\sum_{G\neq 0} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} F_v(\mathbf{G}) \ln \frac{\omega_g}{v_F G}$$

$$=Z_v \ln \frac{v}{v_F}+Z_{\text{loc}}(\mathbf{r}) \ln \frac{2m_e v v_F}{\hbar\omega_g}$$

$$+\sum_{G\neq 0} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} F_v(\mathbf{G}) \ln \frac{\omega_g}{v_F G} \tag{5.3-16}$$

式中 $F_v(G)=Z_v F'_v(G)$ 及 $Z_{\text{loc}}(\mathbf{r})=\sum_{\mathbf{G}} e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} F_v(\mathbf{G})$。这就给出了方程 (5.3-2) 的结果，但又考虑了电子气体密度的变化而加上一个修正项；艾卜利顿 (Appleton) 等人[11]的结果在高速区域是成立的，因为这时修正项可以略去。但是，由于对数项随速度变化很慢，表明除了高速（兆电子伏以上）的情况外是难以满足的。然而，速度很高时又必须考虑相对论效应。

方程 (5.3-15) 还可表示成

$$-\frac{dE}{dx}(r)=\frac{2\pi Z_1^2e^4}{m_ev^2}N\left[(Z_v+Z_{loc}(\mathbf{r}))\ln\frac{2m_ev}{\hbar\omega_g}+c(\mathbf{r})\right]$$

$$c(\mathbf{r})=\sum_{G\neq 0}e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}F_v(\mathbf{G})\ln\frac{2m_e\omega_g}{\hbar G^2} \qquad (5.3\text{-}17)$$

这同艾斯本逊等根据量子微扰法得到的表达式相吻合*)。这里所给的步骤却大为简化了。

(5.3-12)式[或(5.3-15)式]同适当的芯电子处理[例如，戴托曼(Dettmam)理论[41]]结合起来可以提供沟道阻止能力的完整理论。

三 芯电子对沟道离子能量损失的贡献

把晶体中沟道离子能量损失看成比较自由的价电子激发和束缚较紧的芯电子激发两部分的贡献是比较成功的。即

$$S_{ch}=-\frac{dE}{dx}\bigg|_{ch}=S_{val}+\sum\Delta E(b,v) \qquad (5.3\text{-}18)$$

现在讨论芯电子的贡献。根据哈托雷-福克(Hartree-Fock)独立粒子模型来处理芯电子问题，把芯电子的贡献看成是每个电子贡献之和。在随机碰撞中，利用图5.3-4所示的碰撞参数模型和推广了的振子强度取和规则来确定对每个芯电子的能量损失。(5.3-18)式中的 $\Delta E(b,v)$ 是碰撞参数 b、速度 v 一次碰撞中转移电子的平均激发能。如果对整个沟道截面取平均就可得到随机阻止能力，戴托曼得到

$$S_{ram}=-\frac{dE}{dx}\bigg|_{ram}$$

$$=\frac{4\pi Z_1^2e^4}{m_ev^2}N\left[Z_v\ln\frac{2m_ev^2}{\hbar\omega_p}+\sum_{j=1}^{Z_{co}}\ln\frac{2m_ev^2}{\hbar\omega_j'}\right] \qquad (5.3\text{-}19)$$

式中 Z_{co} 为芯电子数目，且

---

*) 参见文献[33]的方程(24)。

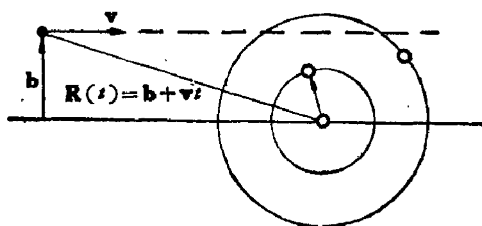


图 5.3-4 沟道质子同晶格离子的单次碰撞

$$\omega_i'^2 = \frac{\langle j|P^2|j\rangle}{\langle j|r^2|j\rangle} \tag{5.3-19a}$$

这里 P 和 r 分别是动量和位置算符，$|j\rangle$ 是电子 j 的哈托雷-福克波函数，ω_P 可由价电子密度确定［(5.3-8b)式］。如果用平均电离势

$$I = \hbar\left[\omega_P \prod_{j=1}^{Z_{co}} \omega_j'\right]^{1/Z_2} \tag{5.3-20}$$

可把 (5.3-19) 式写成贝特-布洛赫公式 (2.3-30) 的形式。把阻止能力分成芯电子的高激发和低激态的贡献也可推出均分规则。即是

$$S_{r,H} \simeq \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} N \sum_{j=1}^{Z_{co}} \ln \frac{2m_e v^2}{\hbar|\omega_j|}$$
$$S_{r,L} \simeq \frac{2\pi Z_1^2 e^4}{m_e v^2} N \sum_{j=1}^{Z_{co}} \ln \frac{2m_e v^2|\omega_j|}{\hbar\omega_j'^2} \tag{5.3-21}$$

这里 $S_{r,H}$ 和 $S_{r,L}$ 是随机的高激发和低激发对阻止能力的贡献，$\hbar\omega_j$ 是第 j 个电子的束缚能。在高速下，对数项的差别可以忽略，故有

$$S_{r,H} \simeq S_{r,L} \tag{5.3-22}$$

在沟道条件下，用不同的方式考虑芯电子的高激发和低激发。低激发时是用对所有碰撞参数求平均的自洽条件来求能量损失，结果和 (5.3-21) 式的随机结果一样。这个条件给出了低激发的平均激发能

$$\varpi_j = \frac{3}{2\langle j|r^2|j\rangle} \tag{5.3-23}$$

于是，对单个原子的能量损失是碰撞参数 b 的函数(图 5.3-4)，而且，当 $b \gg \langle j|r|j\rangle$ 时，根据偶极近似，得到对一个束缚电荷的能量损失是

$$\Delta E_L(b) = \frac{2}{m_e}\frac{Z_1^2e^4}{v^4}\sum_{j=1}^{Z_{co}}\varpi_j^2\left[K_0^2\left(\frac{b}{b_j}\right)+K_1^2\left(\frac{b}{b_j}\right)\right] \tag{5.3-24}$$

其中 b_j 是第 j 个电子的临界碰撞参数

$$b_j = \frac{v}{\varpi_j} = \frac{2}{3}v\langle j|r^2|j\rangle \tag{5.3-24a}$$

(5.3-24) 式还可近似为

$$\Delta E_L(b) \cong \begin{cases} \dfrac{Z_1^2e^4}{m_e}\cdot\dfrac{2N}{v^2b^2} & \langle j|r|j\rangle \ll b \ll b_j \\ \dfrac{Z_1^2e^4}{m_e}\cdot\pi\sum\limits_j\dfrac{b_j}{b}e^{-2b/b_j} & b \gg b_j \end{cases} \tag{5.3-25}$$

对于 $b \gg b_j$ 时，$\Delta E(b)$ 随 b 增加指数减少；而 b 很小时，$\Delta E(b)$ 是个有限值．但是，碰撞参数 $b \ll \langle j|r|j\rangle$ 区域的芯电子对沟道离子能量损失的贡献是不重要的，故这里未加仔细考虑．

另一方面，利用冲量近似来处理芯电子高激发情形，发现电子密度非常局域的，得到

$$\Delta E_H(b) = \frac{2\pi Z_1^2e^4}{m_ev^2}\sum_{j=1}^{Z_{co}}\rho_j(b)\ln\frac{v^2}{|\omega_j|} \tag{5.3-26}$$

这里 $\rho_j(b)$ 是第 j 个电子沿沟道平均的密度．对大多数沟道离子来说，芯电子密度是很小的，故这种贡献通常略去．因此，把 (5.3-24) 式对 $b \leqslant b_j$ 范围内所有原子取和就可得到芯电子对沟道离子阻尼能力的贡献．

我们这里只说到戴托曼理论中芯电子对沟道阻止能力的贡献，值得指出的是，戴托曼还利用均匀电子气来处理价电子对沟道粒子能量损失的影响，结果同实验误差较大．我们采用空间周期性

表 5.3-2 质子在金刚石晶体沟道中运动，沟道阻止和随机阻止之比[29]

晶格方位	E（兆电子伏）	$\Delta E_C/\Delta E_R$			
		实验	戴托曼	艾斯本逊	方程 (5.3-15)
⟨110⟩	2.537	0.619	0.814	0.485	0.481
	3.721	0.642	0.802	0.486	0.477
	4.771	0.642	0.795	0.489	0.474
	5.756	0.641	0.793	0.491	0.473
	6.787	0.620	0.792	0.493	0.472
	7.810	0.635	0.790	0.495	0.471
	8.831	0.636	0.789	0.497	0.471
	9.847	0.628	0.789	0.499	0.471
	10.857	0.634	0.788	0.500	0.472
	11.862	0.640	0.788	0.501	0.473
⟨111⟩	2.469	0.775	0.820	0.771	0.773
	3.649	0.775	0.811	0.771	0.763
	4.715	0.760	0.809	0.770	0.760
	5.722	0.760	0.808	0.770	0.759
	6.758	0.757	0.806	0.770	0.758
	7.786	0.760	0.805	0.770	0.757
	8.809	0.749	0.805	0.770	0.757
	9.827	0.727	0.805	0.770	0.757
	10.837	0.722	0.805	0.770	0.757
	11.844	0.723	0.805	0.770	0.757
⟨100⟩	2.633	0.754	0.817	0.706	0.707
	3.749	0.761	0.809	0.704	0.694
	4.797	0.741	0.805	0.703	0.691
	5.801	0.728	0.804	0.702	0.689
	6.830	0.723	0.803	0.702	0.688
	7.843	0.729	0.802	0.701	0.688
	8.863	0.715	0.802	0.701	0.688
	9.876	0.718	0.801	0.701	0.688
	10.881	0.711	0.801	0.701	0.687
	11.890	0.693	0.801	0.701	0.687

电子气来处理价电子的贡献[29]，并考虑戴托曼芯电子对阻止能力的影响，计算了沟道阻止 ΔE_C 对随机阻止之比，列于表 5.3-2.

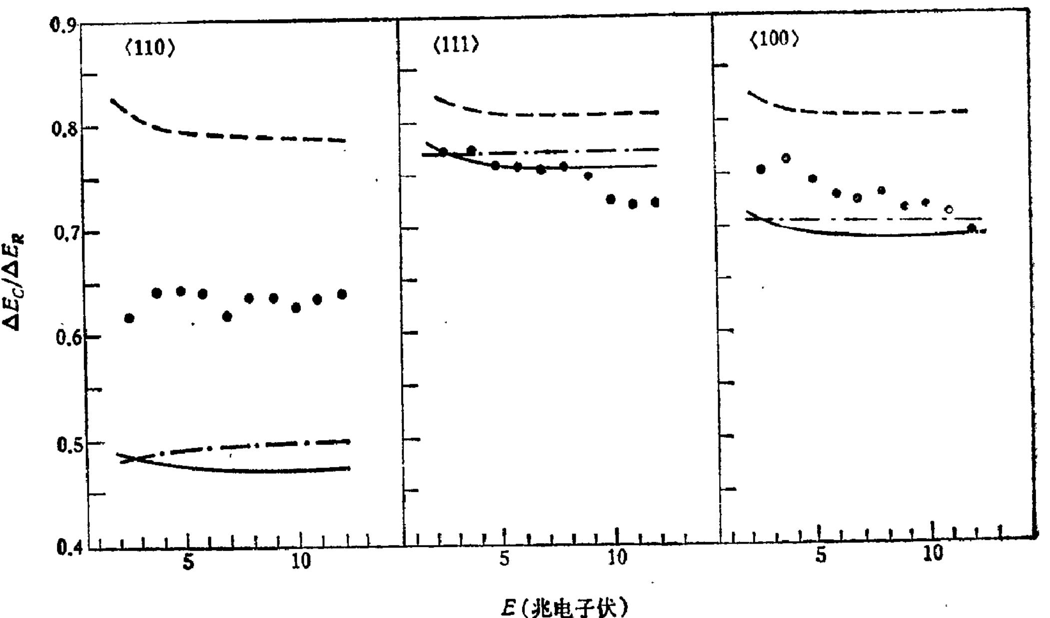


图 5.3-5　沟道方向和随机方向阻止能力之比. ●　实验值，---　戴托曼理论　—·—　艾斯本逊微扰论，——　方程(5.3-15)计算结果

实验值和理论值均取质子入射到金刚石三个主轴方向，即〈110〉、〈111〉和〈100〉，并且取实验能谱的前沿代表能量损失的最小值．在〈111〉和〈100〉情况下，$\frac{\Delta E_C}{\Delta E_R}$ 的实验结果呈现出与能量有关，即在入射粒子能量低时，$\frac{\Delta E_C}{\Delta E_R}$ 增加．由于在这些沟道中，沟道中心处的局部电子密度较高，离散也较大；入射质子能量低时受到这种离散的影响也较大．

理论与实验结果比较表明，戴托曼理论[32]同实验偏离较大，必须把沟道效应对价电子阻尼能力的影响考虑进去，否则能量损失值偏高(图 5.3-5 中的虚线所示)．方程(5.3-15)的结果同艾斯本逊量子微扰理论[33]的结果类似，在〈111〉和〈100〉方向同实验符合较好．但在〈110〉轴方向上，理论值比实验值低很多．应该指出，沟道能量损失的最小值是指那些超沟道离子所经历的能量损失，也即是说，粒子在晶体内运动的整个过程中限制在一个沟道内．这只有在极薄的晶体中可能会出现[17]．对于较厚的晶体．离子总是在同沟道交叉的平面中穿行．特别是对〈110〉轴影响最大的(111)面，离子在〈110〉沟道中运行并排迴于(111)面，至使多重散射的几率大大增加，这可能就是观察值高于理论值的一个原因．

§5.4　离子在晶格中的退道

早在沟道理论建立初期，就指出沟道离子在晶格中运动的横能量不是严格守恒的[5]．其原因有：离子所受的力由于晶格原子的热振动而波动，使离子偏离原来运动的轨道而发生多重散射；沟道中的电子也可以引起多重散射（即上节讨论的能量损失过程）；原子列或平面是由分立原子集合而成，会引起散射；毫无疑问，晶体中的杂质和缺陷也会引起沟道离子的散射．所有这些因素都会导致横能量的增加．如果一个横能量为 $E_\perp$ 的离子损失能量是 δE，那么横能量的改变量为 $\delta E_\perp \sim \delta E\,\frac{E_\perp}{E}$．在完整的(没有缺陷)晶

体中，当离子进入晶体时，上述几种效应中最重要的是原子的振动和电子引起的多重散射而使离子的横能量改变. 总之，横能量增加，横能量分布移向较高的值，近碰的相对产额增加，这时离子束就被认为是退道.

与随机系统中多重散射(第二章)同位置无关的情况不同，在沟道条件下，多重散射随位置变化，因此，横能量随深度的平均改变 $\frac{dE_\perp}{dz}$ 依赖于横能量. 所以，当初离子横能量确定时，角度分散与平均方向上的变化相比很小；或者，横能量的展宽与横能量的变化相比很小. 这就在平衡连续模型的理论框架内产生了两种与之相应的退道模型，不过，它们均需知道 $\frac{dE_\perp}{dz}$. 第一种模型是所谓"扩散模型"，把退道看成是横能量空间的一个扩散过程(有时也用横动量空间)，其横能量分布受福克尔-普朗克 (Fokker-Plank) 方程支配. 第二种模型比较简单，称之为"稳定增加"模型. 它不考虑扩散，而把一个粒子的横能量看成按 $\frac{dE_\perp}{dz}$ 稳定增加，这又决定着分布随深度的变化. 两种模型在给定深度的产额都可由方程(5.2-11)得到. 这里理论上主要用上述两种模型讨论两种散射过程(即热振动和电子散射)对 $\frac{dE_\perp}{dz}$ 的影响. 后面也考虑缺陷对产额的影响.

由于研究退道不仅可以提供沟道离子同晶体基本相互作用理论的直接检验(如沟道效应、阻塞效应、通量峰效应等)，而且会应用于杂质原子定位、核寿命测量和离子注入等的研究. 因此，退道的实验研究也很活跃. 基本方法是研究沟道粒子的背散射能谱和透射能谱. 这里我们也从实验开始给出退道因子的概念，然后再进一步从理论上分析.

一　阻止能力与退道率

由第三章的背散射实验(运动学因子)中，我们已经知道要使

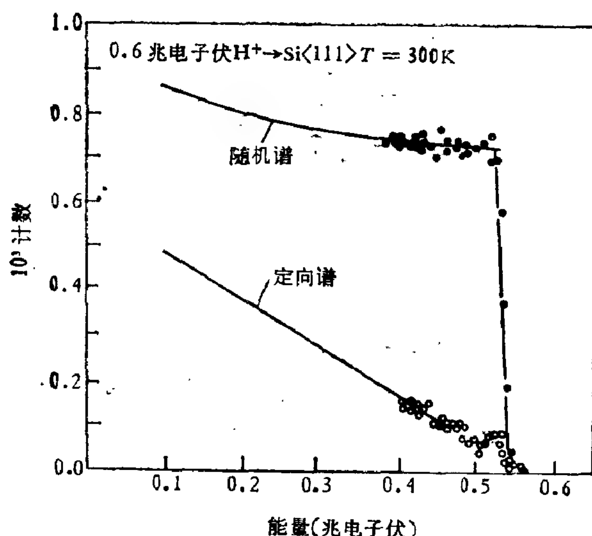


图 5.4-1 0.6 兆电子伏质子自硅靶上背散射能谱
●随机入射； ○沿 ⟨111⟩ 轴入射

入射离子通过大角散射到达探测器，就必须经历同靶原子的近碰。这种相互作用的相对几率对沟道中运动的离子或随机方向运动的离子分别为零和 1；结果只有非沟道或退道离子才能到达探测器．如果忽略离子出射路径的影响，可以认为背射散方法对于定义沟道和退道粒子(以及退道因子)是很理想的．但是，由于热运动等因素影响，既使是沟道粒子，也有一定近碰的几率．图 5.4-1 是相应于定向和随机方向入射的两个典型的背散射能谱．

由图 5.41 中的定向谱看出，随着深度的增加，退道发生了．而穿透深度只能通过运动离子的能量损失来确定．因为入射路径沿沟道方向和随机方向所受的阻止能力不同．所以背散射能谱的解释也分开两个方向，如图 5.4-2．

(i) 随机方向入射．如果质量 M_1 能量 E_0 的离子束在随机方向上打到晶体上，在能量 E_1 处能量间隔 ΔE_1 探测到背散射粒子数是由入射粒子通量 n 乘以微分散射截面和靶原子数 N 成比例的(见 § 3.1，§ 3.2)，即是

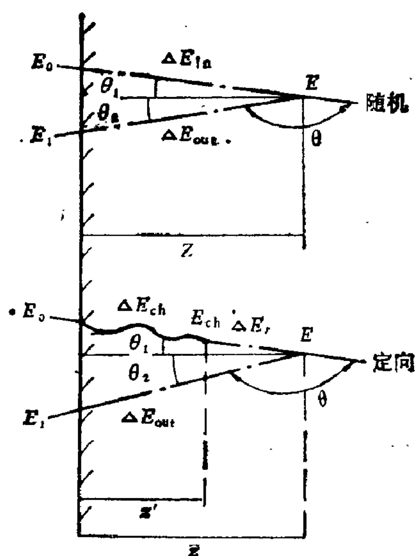


图 5.4-2 离子沿随机方向和定向入射到晶体内的背散射示意图

$$\frac{dY(E_1)}{dE_1}\Delta E_1 = n\frac{d\sigma}{d\Omega}\Delta\Omega N\Delta z \tag{5.4-1}$$

$\Delta\Omega$ 是探测器所张立体角. 由于 $E = E_0 - \Delta E_{in} = E_0 - \int_0^{z/\cos\theta_1} S(E)dz$, 根据 (3.1-15) 式可得

$$E_1 = KE - \Delta E_{out} = K\left(E_0 - \int_0^{z/\cos\theta_1} S(E)dz\right) - \int_{z/\cos\theta_2}^{0} S(E)dz \tag{5.4-2}$$

K 为运动学因子，由 (3.1-2) 式定义. 微分 (5.4-2) 式，就可从 (5.4-1) 式得到随机能谱

$$\frac{dY(E_1)}{dE_1}\Delta E_1 = \frac{F(0)\sigma(E)N}{KS(E) + (\cos\theta_1/\cos\theta_2)S(KE)}\Delta E_1 \tag{5.4-3}$$

$S(E)$ 为阻止能力的函数,是第三章定义的.

(ii) 沟道方向入射. 一个离子沿沟道方向入射到晶体上按理

对背散射谱不做贡献.如果在深度 z' 的地方离子退道了,那么它的行为就象一个随机粒子在深度 z' 地方进入晶体，其能量为 $E_{ch}=E_0-\Delta E_{ch}$，ΔE_{ch} 是沿沟道路径损失的能量.这个离子可在 $z>z'$ 任何深度被散射，这意味着在深度 z 处 Δz 层内散射离子的数目依赖于随机粒子或 z 之前退道粒子的总通量 $F(z)$. 令沟道轨迹的阻止能力 $S^*(E)=\beta S(E)$，于是,背散射能量为:

$$E'=E_0-\Delta E_1=E_0-\int_0^{z'/\cos\theta_1}\beta S(E)dz-\int_{z'/\cos\theta_1}^{z/\cos\theta_1}S(E)dz$$

以及

$$E_1'=KE-\Delta E_{out}=K\left(E_0-\int_0^{z'/\cos\theta_1}\beta S(E)dz\right)$$

$$-\int_{z'/\cos\theta_1}^{z/\cos\theta_1}S(E)dz-\int_{z/\cos\theta_2}^{0}S(E)dz \qquad (5.4\text{-}4)$$

因此,能谱可有

$$\frac{dY'(E_1')}{dE_1'}\Delta E_1'=\int_{z'=0}^{z'=z}\frac{NdF(z')/dz'\sigma(E')dz'}{KS(E')+(\cos\theta_1/\cos\theta_2)S(KE')}\Delta E_1'$$

$$(5.4\text{-}5)$$

于是,退道率，也即是,在深度 z 处退道的粒子通量和离子总通量

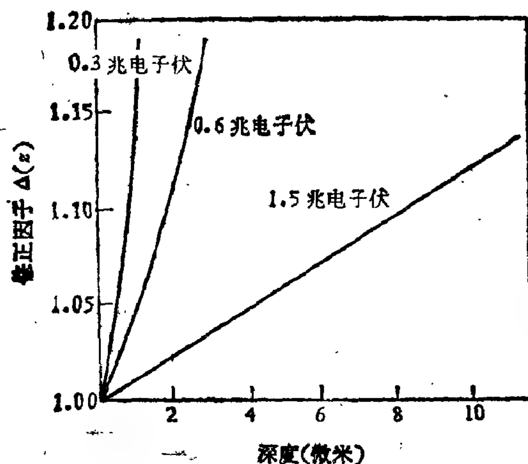


图 5.4-3　计算退道分数 $\chi(z)$ 需要的修正因子 $\Delta(z)$ 同深度关系.不同能量下质子入射到硅<111>轴

之比可以直接从定向能谱和随机能谱得到，

$$\chi(z)=\frac{\int_0^z (dF(z)/dz)dz'}{F(0)}=\frac{dY'/dE'_i}{dY/dE_i}\Lambda(z) \quad (5.4-6)$$

式中修正因子 $\Lambda(z)$ 是解方程(5.4-1)、(5.4-5)和(5.4-6)的迭代步骤得到的[42]. 因能量损失和给定深度离子能量 E 和 E' 在两个谱中是不同的，函数 $\Lambda(z)$ 也要考虑散射截面同能量关系. 图 5.4-3 给出不同能量下的修正因子. 随着能量增加，修正因子随深度变化愈小. 当深度很浅时，修正因子就取 1. 所以它的影响并不很大.

通常并不对绝对退道分数感兴趣，都是采用相对的退道分数 $\chi(z)$，以便对各种实验结果加以比较. 在深度浅时，$\Lambda(z)$ 近于 1，退道分数可直接由定向谱和随机谱比值近似给出.

由于一个粒子沿沟道方向运动所受的阻止能力要比随机方向低，故在深度 z 退道粒子分数 $\chi(z)$ 也可从透射离子束的能谱中确定.

厚度 t 晶体中 z 处退道的一个透射粒子能量是

$$E_t=E_0-\int_0^z \beta S(E)dz'-\int_z^t S(E)dz' \quad (5.4-7)$$

同背散射情况相比. 如果 $S(E)$ 和 $S^*(E)=\beta S(E)$ 是已知的且为单调函数，则 E_t 和 z 的关系似乎是唯一的. 然而，β 依赖于沟道粒子所选的路径，并且退道深度是由阻止能力之差确定的，因此，$S^*(E)$ 中很小的不确定性就会引起 z 有较大的误差. 在实验能量分辨率的条件下很难确定 $S^*(E)$ 的值，加上能量不大高(兆电子伏)的粒子作透射谱须对晶体薄膜制备要求较高. 因此，透射实验很少进行. 但是，近年来，把沟道效应推广到更高的能量区域(从几十亿电子伏特到几千亿电子伏)，特别是高能带电粒子在弯曲晶体中的沟道效应的实验成功，为利用透射谱研究退道效应提供了方便的条件[43]. 例如，图 5.4-4 是靶后垂直平面内探测到透射粒子相对强度的角分布. 可以清楚地分析出透射粒子三部分组成：

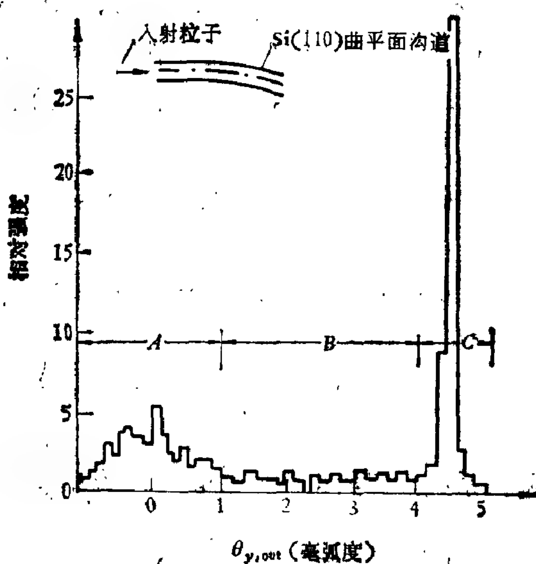


图 5.4-4　8.4 吉电子伏质子通过弯曲晶体 Si(110) 面沟道的透射谱．横坐标是出射角．上方的小图给出晶弯曲沟道示意图．弯曲角度为 4.5 毫弧度，此处沟道部分 $(1-\chi)$ 占 33.6%

(A) 直射方向的退道；(B) 晶体弯曲部分的退道；(C) 沿弯曲沟道前进的沟道粒子．仔细分析这些数据可得到退道长度、退道分数以及同各种晶体条件的关系．

二　原子核和热振动原子的散射

在随机取向的固体中，同原子核弹性碰撞引起角度的均方波动可近似写成

$$\delta\Omega_n^2 \simeq \frac{M_2}{M_1}\frac{\delta E_n}{E} \tag{5.4-8}$$

即是，

$$\delta\Omega_n^2 \simeq \frac{M_2}{M_1}\frac{1}{E}\left(\frac{dE}{dz}\right)_n\delta z$$

$$= \frac{M_2}{M_1}\frac{1}{E}NS_n(E)\delta z \tag{5.4-9}$$

式中 δE_n 是路径 δz 上核碰撞损失的能量，$NS_n(E)$ 为核阻止能力(见§2.2)。[(5.4-9)式包含着大角散射的贡献，因此不适合扩散模型处理，不过暂时不考虑它，以后再讨论]。于是得到横能量的平均波动

$$\overline{\delta E_\perp} = E\delta\Omega_n^2 = \frac{M_2}{M_1} NS_n(E)\delta z \qquad (5.4\text{-}10)$$

这里 $\overline{\delta E_\perp}$ 是粒子初横能量 $E_\perp$ 在路长 δz 上横能量的平均波动。所以，横能量随深度的变化率是

$$\left(\frac{dE_\perp}{dz}\right)_R = \frac{M_2}{M_1} NS_n(E) \qquad (5.4\text{-}11)$$

R 脚标表示随机系统。用约化横能量 $\varepsilon_\perp = \dfrac{2E_\perp}{E\psi_1^2}$ 来表示即有

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_R = \frac{2M_2}{M_1}\frac{N}{E\psi_1^2} S_n(\varepsilon) \qquad (5.4\text{-}11a)$$

沟道粒子在晶体中受到原子导向后不靠近原子，因此多重散射和横能量变化率大大地减弱了。把多重散射粗略地看成一次近碰过程，即看成横平面中一点的多重散射，于是，这个多重散射就由该点散射体密度决定。并且，在采用方阱近似时，把 $E_\perp \leqslant E_\perp^*$ 的离子看成是没有多重散射的沟道粒子，而把 $E_\perp > E_\perp^*$ 的离子看成是沿随机方向运动，并由(5.4-11)式表示。如果用(5.1-31)式的热振动振幅所给出的原子密度，近似程度将会更好。把散射对整个可接收的面积求平均后得出[44]

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_n = \frac{2M_2}{M_1}\frac{S_n(\varepsilon)}{E\psi_1^2}\Pi(\varepsilon_\perp)$$

$$= \left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_R \Pi(\varepsilon_\perp) \qquad (5.4\text{-}12)$$

式中 $\Pi(\varepsilon_\perp)$ 由(5.2-32)式给出，脚标 n 表示原子核引起的散射。

然而，对一些碰撞参数比较大，与屏蔽长度 a 的量级差不多的碰撞，在多重散射中也起重要作用，但却不能看成是一次近碰过程。这样，(5.4-12)式对散射是估计不足的，特别是对那些横能

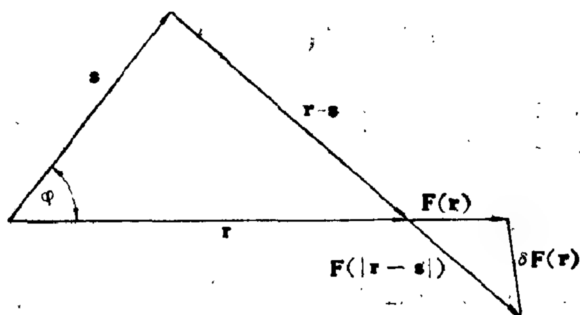


图 5.4-5 方程(5.4-14)中各量的图示

量低的粒子，因为它们同原子列的距离比较远。若沿原子列对作用力波动取均方和,则可得

$$\overline{\delta E_{\perp}} = \frac{d}{4E} < (\delta \mathbf{F}(\mathbf{r}))^2 > \delta z \tag{5.4-13}$$

式中 $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ 是 $\mathbf{r}$ 处的横向力，$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\mathrm{grad}\, U(\mathbf{r})$，括号$\langle \cdots\cdots \rangle$ 表示对可接收面积求平 均[见(5.2-6)式]，以及 $\delta F(\mathbf{r})$ 是 $\mathbf{r}$ 处力的扰动。根据图 5.4-5 对热振动分布求平均

$$(\delta F(\mathbf{r}))^2 = \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{dS^2}{\rho_2^2} e^{-S^2/\rho_2^2} [F^2(\mathbf{r}) + F^2(\mathbf{r}-\mathbf{s}) - 2\mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}-\mathbf{s})] \tag{5.4-14}$$

将此方程按 $\frac{\rho_2^2}{r^2}$ 展开并取一级近似

$$\langle (\delta F(r))^2 \rangle = \frac{\rho_2^2}{2} \left\langle \frac{F^2(r)}{r^2} + F'^2(r) \right\rangle \tag{5.4-14a}$$

再取二级近似,在单原子列模型中求出(5.4-12)式的修正

$$\left(\frac{d\varepsilon_{\perp}}{dz}\right)_s = \left(\frac{d\varepsilon_{\perp}}{dz}\right)_R (\gamma_1 + \gamma_2) \tag{5.4-15}$$

式中约化因子 $\gamma_1(\varepsilon_{\perp})$ (一级展开)和 $\gamma_2(\varepsilon_{\perp})$ (二级展开)是由下列两式决定的

$$\gamma_1 = \frac{1}{A(\varepsilon_{\perp})} \frac{1}{2L_s} \frac{\rho_2^2}{C^2a^2} \left[(Ae^{\varepsilon_{\perp}} + 2/3) \left(1 - \frac{e^{-\varepsilon_{\perp}}}{A}\right)^3 \right.$$

$$-(A+2/3)\left(1-\frac{1}{A}\right)^3\Big] \qquad (5.4\text{-}15a)$$

$$\gamma_2=\frac{1}{A(\varepsilon_\perp)}\frac{1}{2L_n}\frac{\rho_2^4}{C^4a^4}\Big[\Big(A^2e^{2\varepsilon_\perp}-2Ae^{\varepsilon_\perp}-\frac{4}{A}e^{-\varepsilon_\perp}$$

$$-\frac{7}{A^2}e^{-2\varepsilon_\perp}+\frac{26}{A^3}e^{-3\varepsilon_\perp}-\frac{24}{A^4}e^{-4\varepsilon_\perp}+\frac{36}{5A^5}e^{-5\varepsilon_\perp}\Big)$$

$$-\left(A^2-2A-\frac{4}{A}-\frac{7}{A^2}+\frac{26}{A^3}-\frac{24}{A^4}+\frac{7.2}{A^5}\right)\Big] \qquad (5.4\text{-}15b)$$

式中 $L_n=\ln 1.29\varepsilon$ 是(2.2-42)式中的对数项。

如果只用一级展开，$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_n$ 可以写成

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_n=\frac{1}{A(\varepsilon_\perp)}\frac{1}{4z_n}\Big[\left(Ae^{\varepsilon_\perp}+\frac{2}{3}\right)\left(1-\frac{e^{-\varepsilon_\perp}}{A}\right)^3$$

$$-\left(A+\frac{2}{3}\right)\left(1-\frac{1}{A}\right)^3\Big] \qquad (5.4\text{-}16)$$

其中

$$z_n=\frac{C^2a^2}{\rho_2^2}\frac{1}{\pi Nd^2\phi_1^2}$$

为特征长度，把热振动项变换成不同轴、能量和温度。当 $r\ll\rho$ 时(5.4-15)式的展开式成立，也即是说，(5.4-15)式满足 $E_\perp\ll U_1(\rho)$ 的条件。例如，在高横能量时，即横能量大于热振动修正势(5.1-33)式的最大值时，横能量随深度增加率趋于随机值。

然而，(5.4-11a)的随机值包含大角散射的贡献，因此，对扩散估计过高了。例如，用它来计算硅晶中角度的均方波动[(5.4-9)式]大约是小角多重散射的高斯部分的2到3倍。另外，如把单次散射（即大角散射）作为扩散方法中的吸收项来处理，也是很小的。

在(5.4-9)和(5.4-11)式中，处理这类问题需要把能量损失限制在散射角比某一截止值 ϕ_D 小的碰撞内。散射角大于 ϕ_D 的碰撞可作为吸收项来处理，就是说，把它们看成转变为随机束。对沟道

粒子而言，这个角度 ψ_D 的量级就是临界角 ψ_1。因此，由 (2.2-1) 式得到角度小于 ψ_D 碰撞的核阻止截面是

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_{n,D} = N\int_0^{T_D} T d\sigma(E, T)$$

在 $M_1 \ll M_2$ 时，

$$T_D \simeq T_m \sin^2\frac{\psi_D}{2} = \frac{1}{4}T_m\psi_D^2$$

根据 § 2.1 的结果，得到阻止能力是

$$-\left(\frac{d\varepsilon}{d\rho}\right)_{n,D} = S_{n,D}(\varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon}\int_0^{t_D^{1/2}} f(t^{\frac{1}{2}})dt^{\frac{1}{2}}$$

式中

$$t_D = \frac{\varepsilon^2\psi_D^2}{4}$$

于是

$$S_{n,D}(\varepsilon) = \frac{t_D^{1/2}}{\varepsilon}\frac{1}{t_D^{1/2}}\int_0^{t_D^{1/2}} f(t^{\frac{1}{2}})dt^{\frac{1}{2}}$$

$$= \frac{t_D^{1/2}}{\varepsilon}S_n(t_D^{1/2})$$

因此，对于随机运动，仅由于扩散使横能量的变化是

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_{R,D} = 2\frac{M_2}{M_1}\frac{N}{E\psi_1^2}\frac{t_D^{1/2}}{\varepsilon}S_n(t_D^{1/2}) \qquad (5.4\text{-}17)$$

一般情况下，这比 (5.4-11) 式也小 2—3 倍。例如，1 兆电子伏质子人射到金刚石〈110〉轴，(5.4-11) 式是 (5.4-17) 式的 3.04 倍。

把 (5.4-17) 式作为随机散射，又把 (5.4-15) 式作为横能量小的值，就可以找到适合于所有横能量的函数。舍奥托 (Schiøtt) 等人在 (5.4-15) 式的基础上提出横能量变化的表达式为

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_n = \left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_R \gamma \qquad (5.4\text{-}18)$$

及

$$\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 + \left(1 + \frac{\gamma_2}{\gamma_1}\right)$$

对许多晶体都有较好的结果。它适用于所有约化横能量 $\varepsilon_\perp$ 低于

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_R \gamma = \left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_{R,D}$$

值的情况。

三 电子引起的散射

对于随机运动，一个离子运动角度因电子散射引起的均方波动可由 (2.6-8) 式得

$$\delta\Omega_e^2 \simeq \frac{m_e}{M_1}\frac{\delta E_e}{E} = \frac{m_e}{M_1}\frac{1}{E}\left(\frac{dE}{dz}\right)_e \delta z$$

$$= \frac{m_e}{M_1}\frac{1}{E} n_e S_e \delta z \qquad (5.4\text{-}19)$$

式中 δE_e 是路径 δz 上传给电子的能量损失，n_e 是电子密度，S_e 是每个电子的阻止能力。多重散射主要是同电子近碰产生的，而远距离共振碰撞会导致比较大的能量转移和小的动量转移，且对多重散射没有什么贡献。对于电子气体，可得到一个电子激发和等离子体发射引起多重散射之比

$$\frac{\delta\Omega_{e1}^2}{\delta\Omega_{p1}^2} \simeq \frac{4E_F z_1}{\hbar\omega_p} \ln \frac{2m_e v^2}{\hbar w_p}$$

式中 E_F 为费米能量。1 兆电子伏质子在金刚石的价电子气体中可得到

$$\delta\Omega_{e1}^2 \simeq 16\delta\Omega_{p1}^2$$

因此，一级近似下可忽略等离子体激发所引起的多重散射。

在沟道情况下，电子密度在沟道纵向变化比较慢，因而电子影响引起横能量随深度的变化是

$$\left(\frac{dE_\perp}{dz}\right)_e \simeq \frac{m_e}{M_1} S_e\langle n_e(\mathbf{r})\rangle \qquad (5.4\text{-}20)$$

式中电子密度是对可接受面积求平均，$n_e(\mathbf{r})$ 是横平面中 $\mathbf{r}$ 处的电子密度，用泊松方程从原子列势得到电子密度，上式变成

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_e = \frac{1}{z_e}\left(1 - \frac{e^{-\varepsilon_\perp}}{A}\right) \qquad (5.4\text{-}21)$$

其中

$$Z_e = \frac{E}{\pi Z_1 e^2 N d L_e} \tag{5.4-21a}$$

和

$$L_e = \ln \frac{2m_e v^2}{I}$$

或者采用实验阻止能力

$$L_e = \frac{m_e v^2}{4\pi Z_1^2 e^4 N Z_2}\left(\frac{dE}{dx}\right)_e \tag{5.4-22}$$

这个表达式所得到的 $\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dx}\right)_e$ 值在小 $\varepsilon_\perp$ 时是太小了，因为它所用的是平均电离势，而没有考虑紧束缚电子电离的减弱。为此，就提出了电子气体模型，其等离子频率 ω_P 依赖于局部电子密度[(5.3-86)式]。邦德罗卜（Bonderup）等人利用林哈德标准势给出的电子密度和单原子列模型得到[45]

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dx}\right)_e = \frac{1}{Z_e}\left(1-\frac{e^{-\varepsilon_\perp}}{A}\right)\cdot\left[1-\frac{1}{L_e}\ln\left(1-\frac{e^{-\varepsilon_\perp}}{A}\right)\right] \tag{5.4-23}$$

(5.4-21)和(5.4-23)两式建立在近碰和远碰严格等分的基础之上的$\left(即各占\frac{1}{2}\right)$，一般情况下并不如此。而且，(5.1-21)式中的半径 r_0 以外的电子密度忽略不计，所以，用林哈德标准势求出的电子密度在某些情况下只有实际电子密度的 $\frac{1}{4}$。但是，如果把阻止能力分成近碰和远碰，那么，方程(5.3-13)可提供电子多重散射的最好估计。在上述的处理中，常常略去共振(远距离)碰撞的贡献，不需要等分，这样做会使随机多重散射提高20%到40%。同时，利用与实验有关的X射线结构因子，可把理想的电子密度并入理论框架中去。

如果把阻止能力分成单粒子和共振碰撞的贡献，即

$$\frac{dE}{dz}(\mathbf{r})=\left(\frac{dE}{dz}(\mathbf{r})\right)_s+\left(\frac{dE}{dz}(\mathbf{r})\right)_R$$

横能量随深度的变化率可以写成

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}(\varepsilon_\perp)\right)_e=\frac{2}{E\psi_1^2}\frac{m_e}{M_1}\left\langle\left(\frac{dE}{dz}(\mathbf{r})\right)_s\right\rangle$$

$$=\frac{2}{E\psi_1^2}\frac{m_e}{M_1}\frac{1}{A(\varepsilon_\perp)}\int_{U(r)<E_\perp}\left(\frac{dE}{dz}(\mathbf{r})\right)_s d^2r$$

(5.4-24)

显然有

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}(0)\right)_e=\frac{2}{E\psi_1^2}\frac{m_e}{M_1}\left(\frac{dE}{dz}\right)_{r,\min} \qquad (5.4\text{-}25)$$

式中 $\left(\frac{dE}{dz}\right)_{r,\min}$ 是处在势最小值位置的单粒子阻止能力。一般来说，方程(5.4.24)可利用多原子列模型进行数值解。但 $\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_e$ 在整个横能量范围仅改变2倍，从 $E_\perp=0$ 的最小值到 $E_\perp \gtrsim E\psi_{1/2}^2$ 的一个固定值。确定 $\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_e$ 对 $\varepsilon_\perp$ 的严格关系必须作许多近似。类似(5.4-21)和(5.4-23)式，得到 $\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_e$ 近似表示式

$$\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_e=\frac{1}{z_e}S_r\left(1-\frac{e^{-\varepsilon_\perp}}{S_c}\right) \qquad (5.4\text{-}26)$$

式中

$$S_r=\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}(\varepsilon_\perp\to\infty)\right)_e$$

$$S_c=\frac{S_r}{S_r-\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}(0)\right)_e z_e}$$

其中 z_e 由(5.4-21a)式给出，为表征散射特性的标准长度。而 $\varepsilon_\perp=0$ 的 $\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_e$ 和 $\varepsilon_\perp\to\infty$ 的 $\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_e$ 可分别从(5.4-25)式和随机散射中求出。

当 $S_r=1$，$S_c=A$ 时，(5.4-26)式变成(5.4-21)式；而采

表 5.4-1 金刚石主轴方向的电子散射长度 z_e

能量（兆电子伏）	z_e（微米）〈110〉	〈111〉	〈100〉
1.0	1.57	1.29	1.11
4.5	4.85	3.95	3.43
7.0	6.76	5.53	4.78
8.9	8.09	6.62	5.72

用电子气体模型时就与(5.4-23)式符合。

在金刚石中退道主要是由电子引起的，因此产额随深度的变化曲线类似于电子散射引散引起横能量深度变化的能量关系。这包含在特征长度[(5.4-21a)式]之中。表 5.4-1 给出金刚石各主轴的电子散射长度 z_e。图 5.4-6 给出不同能量质子入射到金刚石〈111〉轴的归一产额同 z/z_e 深度标度之间的关系。可以看出理论同实验符合得较好，只是 1.0 兆电子伏能量的理论曲线偏高。图 5.4.6 所示的结果表明质子在金刚石中退道的主要机理是电子的多重散射。

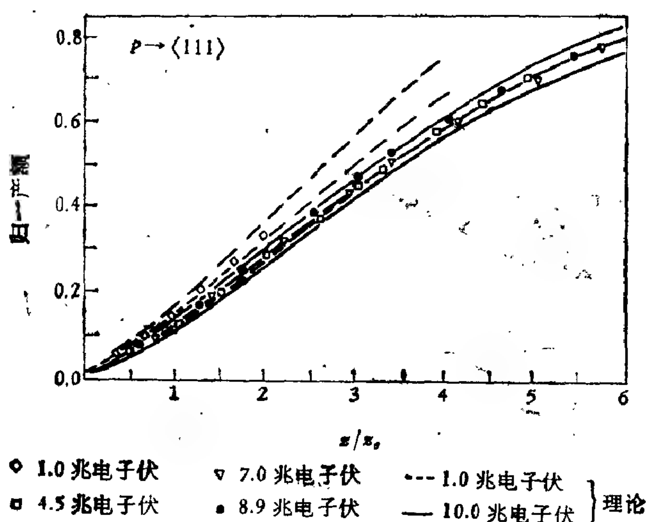


图 5.4-6 质子入射到金刚石〈111〉沟道归一产额同标度深度的关系。实线和虚线分别是 1.0 兆电子伏和 10.0 兆电子伏的理论值

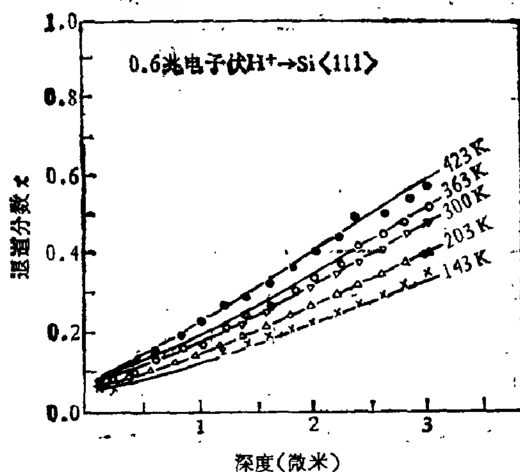


图 5.4-7 不同温度下 0.6 兆电子伏质子沿 Si〈111〉轴的退道分数同深度的关系

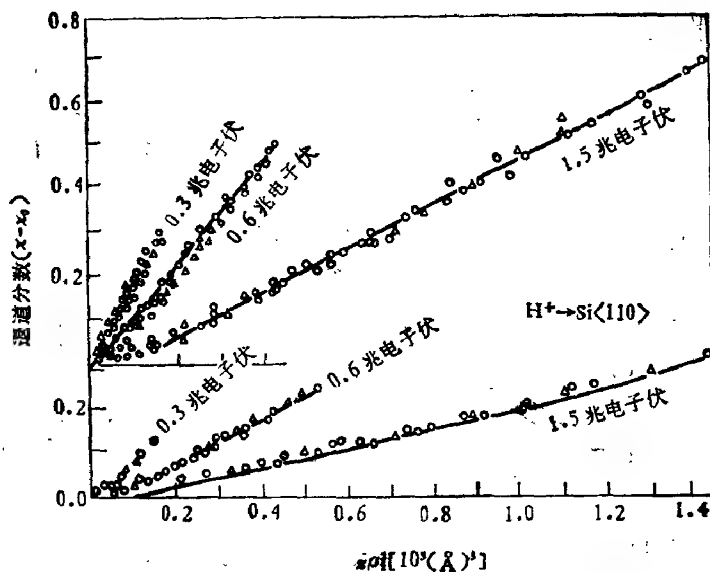


图 5.4-8 不同温度下质子沿 Si〈111〉 和 〈110〉 沟道的退道分数 $\chi(z)-\chi(0)$ 对 $z\rho_i^2$ 的关系[45]： △86K ■143K, ▲203K, ●330K, □363K, ○423K

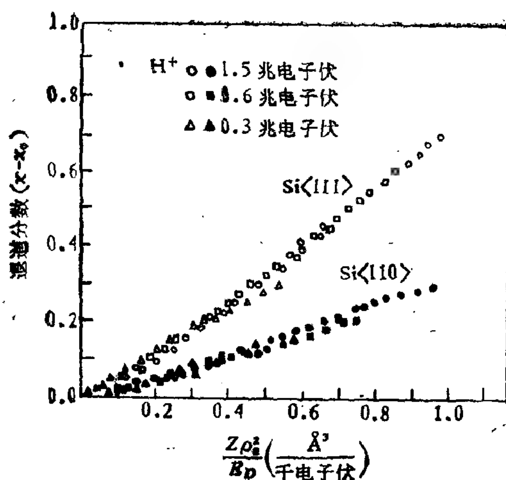


图 5.4-9　质子沿 Si⟨111⟩ 和 ⟨110⟩ 的退道分数 $\chi(z)-\chi(0)$ 同 $z\rho_2^2/E_0$ 的关系[42]

系统研究质子和氘在硅和锗中退道同温度和能量的关系[42]，表明在穿透较深时 $\chi(z)$ 与穿透深度有近似线性关系，而不是简单的指数关系，如图 5.4-7 所示。进一步通过一个标度参数 $z\rho_2^2/E$ 把沿硅和锗主轴的退道率 $\chi(z)-\chi(0)$ 表示成深度 z、束流能量 E_0 和均方振幅 ρ_2^2 的函数，示于图 5.4-8 和 5.4-9。$\chi(0)$ 是晶体表面的最小产额。在图 5.4-8 中 $\chi(z)$ 同均方振幅有简单的比例关系，表明在这种情况下束流散射的主要贡献是晶格原子核的振动，与温度无关的电子气体的贡献很小。这与金刚石（图 5.4-6）情况是不同的，无论是核散射还是电子散射，束流角度展宽使横能量增加均同能量成反比［(5.4-8) 和 (5.4-19) 式］，于是有

$$\delta E_\perp \propto E\cdot(\delta\Omega^2)\propto\frac{1}{E}$$

图 5.4-9 证实了这一点。

四　退道的稳定增加模型

如果横能量的深度变化率 $\frac{dE_\perp}{dz}$ 随横能量变化很快，那么，某

一个初横能量的展宽会比横能量沿某段路长 δz 的纯变化小得多．这时，横能量的扩散可以略去，并且一个离子的横能量会按 $\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}$ 稳定增加．实际上，原子核热振动对横能量随深度变化率的贡献大大超过了电子的贡献(尤其是大横能量时)，而且在 $E_\perp \sim E\psi_{1/2}^2$ 的区域增加很快．因此，为了确定产额随深度的变化，可把稳定增加模型应用到退道计算去．

横能量随深度的总变化是

$$\frac{d\varepsilon_\perp}{dz} = \left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_n + \left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_e \qquad (5.4\text{-}27)$$

一个具有初能量 $E_{\perp 0}$ 离子将按 (5.4-27) 式来增加其横能量，直至在深度 z^* 处离子的横能量达到 $E_\perp^*$，且认为这时离子就退道了[也即是，使用了方阱近似 (5.2-29) 式]．函数(5.4-27)式单调增加，因此，$E_\perp > E_{\perp 0}$ 的离子会在深度 $z < z^*$ 处退道．所以，在 z^* 处的产额是

$$\chi(z^*) = \int_{E_{\perp 0}}^{\infty} g(E_\perp)dE_\perp \equiv G(E_{\perp 0}) \qquad (5.4\text{-}28)$$

其中

$$E_{\perp 0} = E_{\perp 0}(z^*)$$

深度 z^* 是由

$$z^*(E_\perp, 0) = \int_{E_{\perp 0}}^{E_\perp^*} \frac{1}{\frac{dE_\perp}{dz}} dE_\perp \qquad (5.4\text{-}29)$$

这样任何深度 z^* 处的产额可从 $G(E_{\perp 0})$ 和 $E_{\perp 0}(z^*)$ 找出．把方程 (5.4-28) 和 (5.4-29) 作数值积分而产额

$$\chi(z) = G(E_{\perp 0}(z))$$

由 $z^*(E_{\perp 0}) = z$ 的图解得到．

五 轴向沟道的扩散模型

邦德罗卜等人[45]在连续平衡模型的基础上研究了离子的退道，即是把离子向较高横能量的运动看成是离子受到原子列上的核和电子多重散射而在横能量空间的扩散，其横能量的变化由

(5.4-27)式给出. 从而给出离子退道更为一般的形式.

讨论一束能量为E的粒子以同原子列成小角ϕ入射到晶体上，z为轴向. 如果r表示入射粒子到一原子列的距离，那么在连续近似下，由§5.2的讨论可知，横能量在表面$z=0$处的分布是

$$g(\varepsilon_{\perp},0)d\varepsilon_{\perp}=\frac{d(r^2)}{r_0^2} \tag{5.4-30}$$

在图5.4-10中，πr_0^2是每个原子列在x-y平面上的面积[见(5.1-21)式]，以及r和$\varepsilon_{\perp}$之间可由方程(5.1-19)式给出. 显然，横能量$\varepsilon_{\perp}$的粒子在x-y平面内在面积$A(\varepsilon_{\perp})=\pi r_0^2-\pi r_{\min}^2$内有相等的几率. 因此，横能量$\varepsilon_{\perp}$的粒子在路径长$dz$上散射到$(\varepsilon_{\perp}',\varepsilon_{\perp}'+d\varepsilon_{\perp}')$的几率与$z$无关，且由$P(\varepsilon_{\perp}',\varepsilon_{\perp})d\varepsilon_{\perp}'dz$表示[参见(5.2-18)式]. 于是，横能量分布$g(\varepsilon_{\perp},z)$是

$$\begin{aligned}g(\varepsilon_{\perp},z)d\varepsilon_{\perp}=&\int_{\varepsilon_{\perp}'}(d\varepsilon_{\perp}'g(\varepsilon_{\perp}',z-dz))(dzP(\varepsilon_{\perp},\varepsilon_{\perp}')d\varepsilon_{\perp})\\&+g(\varepsilon_{\perp},z-dz)d\varepsilon_{\perp}\Big(1-\int_{\varepsilon_{\perp}}P(\varepsilon_{\perp}',\varepsilon_{\perp})\\&\cdot d\varepsilon_{\perp}'dz\Big)\end{aligned} \tag{5.4-31}$$

令dz趋于0，

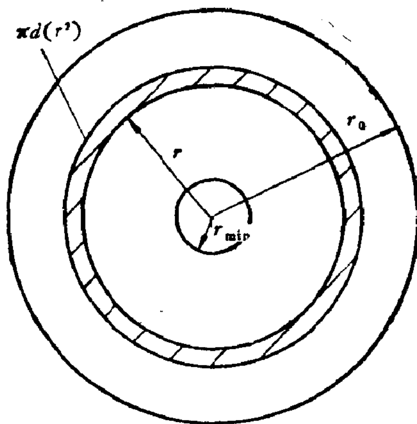


图5.4-10 晶格轴向原子列横平面的示意图

$$\frac{\partial g(\varepsilon_\perp, z)}{\partial z} = \int d\varepsilon'_\perp [P(\varepsilon_\perp, \varepsilon'_\perp) g(\varepsilon'_\perp, z)$$

$$- P(\varepsilon'_\perp, \varepsilon_\perp) g(\varepsilon_\perp, z)] \qquad (5.4\text{-}31a)$$

基本散射事件是由横动量 $\mathbf{P}_\perp$ 的变化来表征的。在一点 $\mathbf{r}$ 处散射几率 $P_r(\mathbf{P}'_\perp, \mathbf{P}_\perp)$ 是对称的，即

$$P_r(\mathbf{P}'_\perp, \mathbf{P}_\perp) = P_r(\mathbf{P}_\perp, P'_\perp) \qquad (5.4\text{-}32)$$

由横动量空间的体积元和横动能空间的相应体元正比例，即 $\pi d(P_\perp^2) \propto d\varepsilon_{\perp,kin}$，并且势能在散射过程中不变，所以，方程 (5.4-32) 得出

$$P_r(\varepsilon'_\perp, \varepsilon_\perp) = P_r(\varepsilon_\perp, \varepsilon'_\perp) \qquad (5.4\text{-}33)$$

横能量 $\varepsilon_\perp$ 和 $\varepsilon'_\perp$ 应超过 $U(r)$。

现将几率对 $\mathbf{r}$ 平均，$\varepsilon_\perp$ 和 $\varepsilon'_\perp$ 之间的散射只能发生在接收横能量较低粒子的 x-y 面上的区域，因此

$$P(\varepsilon'_\perp, \varepsilon_\perp) A(\varepsilon_\perp) = P(\varepsilon_\perp, \varepsilon'_\perp) A(\varepsilon'_\perp) \qquad (5.4\text{-}34)$$

在 $\varepsilon_\perp$ 和 $\varepsilon'_\perp$ 交换时可看出 $A(\varepsilon_\perp) \cdot P(\varepsilon'_\perp, \varepsilon_\perp)$ 是对称的。于是定义

$$A\left(\varepsilon_\perp + \frac{\Delta\varepsilon_\perp}{2}\right) \cdot P\left(\varepsilon_\perp + \frac{\Delta\varepsilon_\perp}{2}, |\Delta\varepsilon_\perp|\right)$$

$$= A(\varepsilon_\perp) P(\varepsilon'_\perp, \varepsilon_\perp) \qquad (5.4\text{-}35)$$

其中 $\Delta\varepsilon_\perp = \varepsilon'_\perp - \varepsilon_\perp$。

引入横的相空间的密度 $f(\varepsilon_\perp, z)$，即

$$g(\varepsilon_\perp, z) = A(\varepsilon_\perp) f(\varepsilon_\perp, z) \qquad (5.4\text{-}36)$$

(5.4-31a) 式可写成另外一种形式

$$\frac{\partial f(\varepsilon_\perp, z)}{\partial z} = \frac{1}{A(\varepsilon_\perp)} \int d\Delta\varepsilon_\perp A\left(\varepsilon_\perp + \frac{\Delta\varepsilon_\perp}{2}\right)$$

$$\cdot P\left(\varepsilon_\perp + \frac{\Delta\varepsilon_\perp}{2}, |\Delta\varepsilon_\perp|\right) \cdot [f(\varepsilon_\perp$$

$$+ \Delta\varepsilon_\perp, z) - f(\varepsilon_\perp, z)] \qquad (5.4\text{-}37)$$

正是本节开始所讨论的两种散射机理使函数 $P\left(\varepsilon_\perp + \frac{\Delta\varepsilon_\perp}{2}, |\Delta\varepsilon_\perp|\right)$

在$|\Delta\varepsilon_\perp|$值小时不同于零。第一，在电子散射时，$m_e/M_1$ 是相对动量转移的上限。如果略去低于横能量极小值 $\varepsilon\cdot(m_e/M_1)^2$ 的部分，则横能量变化很小。第二，热振动仅在横动量上引起一个很小的跳动(因为在沟道时入射粒子不能靠近原子核)。况且，我们现在处理的是完美晶体的情况，没有缺陷和杂质引起的退道。

将(5.4-37)式中的 $A\cdot P$ 和 f 绕 $\varepsilon_\perp$ 作泰勒(Taylor)展开，并取一次项的贡献，即得

$$\frac{\partial f(\varepsilon_\perp, z)}{\partial z}=\frac{1}{A(\varepsilon_\perp)}\frac{\partial}{\partial\varepsilon_\perp}\left[A(\varepsilon_\perp)D(\varepsilon_\perp)\frac{\partial f(\varepsilon_\perp, z)}{\partial\varepsilon_\perp}\right]+\frac{\partial}{\partial\varepsilon_\perp}\left[A(\varepsilon_\perp)f(\varepsilon_\perp, z)\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_{\rm damp}\right]\quad(5.4\text{-}38)$$

式中扩散函数 $D(\varepsilon_\perp)$ 是由

$$\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}=\frac{1}{A(\varepsilon_\perp)}\frac{d}{d\varepsilon_\perp}[A(\varepsilon_\perp)D(\varepsilon_\perp)]\quad(5.4\text{-}39)$$

给出，且 $D(0)=0$. 于是

$$D(\varepsilon_\perp)=\frac{1}{A(\varepsilon_\perp)}\int_0^{\varepsilon_\perp}A(\varepsilon'_\perp)\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}(\varepsilon'_\perp)d\varepsilon'_\perp\quad(5.4\text{-}39a)$$

这里 $\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}$ 由(5.4-27)式给出，而 $\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_{\rm damp}$ 是由于离子的横向运动受到阻尼而使横能量衰减的变化率。由于这一项常常很小，故略去后，(5.4-38)式给出

$$\frac{\partial f}{\partial z}=\frac{1}{A(\varepsilon_\perp)}\frac{\partial}{\partial\varepsilon_\perp}\left[A(\varepsilon_\perp)D(\varepsilon_\perp)\frac{\partial f}{\partial\varepsilon_\perp}\right]=D(\varepsilon_\perp)\frac{\partial^2 f}{\partial\varepsilon_\perp^2}+\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\frac{\partial f}{\partial\varepsilon_\perp}\quad(5.4\text{-}40)$$

当离子进入晶体不深时，$E\psi_{1/2}^2$ 附近的横能量区域对近碰产额的变化起着最重要的作用。因此，$A(\varepsilon_\perp)\simeq1$ 并且(5.4-40)式变为

$$\frac{\partial g(\varepsilon_\perp, z)}{\partial z}=D(\varepsilon_\perp)\frac{\partial^2 g}{\partial\varepsilon_\perp^2}+\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\frac{\partial g}{\partial\varepsilon_\perp}\quad(5.4\text{-}41)$$

及

$$D(\varepsilon_\perp) = \int_0^{\varepsilon_\perp} \frac{d\varepsilon_\perp}{dz}(\varepsilon'_\perp)d\varepsilon'_\perp \tag{5.4-41a}$$

一般来说，这个方程必须进行数值解 $g(\varepsilon_\perp)$，然后从 (5.2-11) 式

$$\chi(z) = \int_0^\infty g(\varepsilon_\perp; z)\Pi(\varepsilon_\perp)d\varepsilon_\perp$$

确定产额。后面再谈数值解法。

这里先假定多重散射与位置无关，可得到方程 (5.4-41) 一种简单的解。多重散射与位置无关表明下式的成立：

$$\delta\Omega^2 = \frac{\psi_1^2}{z_D}\delta_z \tag{5.4-42}$$

式中 z_D 表示 $\delta\Omega^2$ 变成等于 ψ_1^2 的距离。于是

$$\frac{d\varepsilon_\perp}{dz} = \frac{2}{z_D} \tag{5.4-43}$$

这样，当初能量分布 $g(\varepsilon_\perp, 0) = \delta(0)$ 时，利用拉普拉斯变换可解方程 (5.4-41)，

$$g(\varepsilon_\perp, z) = \frac{z_D}{2z}e^{-\frac{\varepsilon_\perp z_D}{2z}} \tag{5.4-44}$$

再利用方阱近似得到的反应函数 $\Pi(\varepsilon_\perp)$ [见 (5.2-29 式]，于是，产额是

$$\chi(z) = \exp\left(-\frac{\varepsilon_\perp^* z_D}{2z}\right)$$

且，在 $E_\perp^* = E\psi_1^2(\varepsilon_\perp^* = 2)$ 时，

$$\chi(z) = \exp\left(-\frac{z_D}{2}\right) \tag{5.4-45}$$

此式意味着 $\chi(0) = 0$，即在表面的产额为零。显然这同实际测量结果不符。如果把测量的最小产额 $\chi(0) = \chi_{min}$ 考虑进去，则可写成

$$\chi(z) = \chi_{min} + (1 - \chi_{min})\exp\left(-\frac{z_D}{2}\right) \tag{5.4-45a}$$

在同实验结果比较时，实际把 z_D 看成一个拟合参数。如果横能量

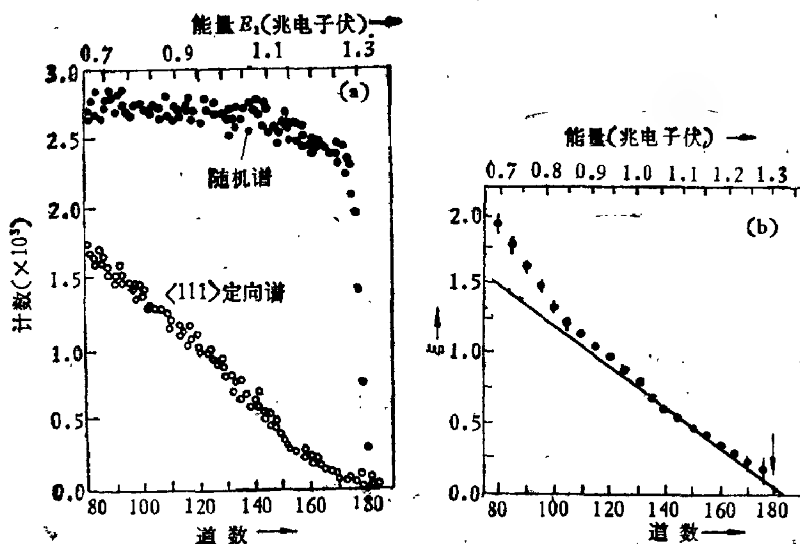


图 5.4-11 (a) 1.5 兆电子伏质子自 Si〈111〉 方向和随机方向的背散谱(室温下)[47]. (b) 为图 5.4-11(a) 中定向谱的 ξ 同能量的关系. 其中 $\xi=\left[\ln\frac{1-\chi_{\min}}{\chi(z)-\chi_{\min}}\right]^{-1}$, $\chi(z)$ 则由方程 (5.4-45b) 式给出

分布具有一定的初分散，得到[47]

$$\chi(z)=\chi_{\min}+(1-\chi_{\min})\exp\left(-\frac{z_D}{z+\Delta z}\right) \quad (5.4\text{-}45b)$$

其中 z_D 和 Δz 均看成拟合参数，并同质子在硅和锗中的退道实验测量拟合很好，如图 5.4-11 所示.

若把 $\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}(\varepsilon_\perp)$ 对横能量空间的"沟道"区域 $\varepsilon_\perp\leqslant\varepsilon_\perp^*$ 求平均来确定 z_D 可把这种方法同一般的扩散理论联系起来.

采用 (5.4-43) 式的简单形式可以得到 (5.4-41) 方程的简单解，略加修正又能与某些实验结果相符合(图 5.4-11). 例如用单原子列模型的横能量分布[见 (5.2-23) 和 (5.2-25) 式]

$$g(\varepsilon_\perp,0)=(A-1)\frac{Ae^{\varepsilon_\perp}}{(Ae^{\varepsilon_\perp}-1)^2} \quad (5.4\text{-}46)$$

来解方程 (5.4-41)，这里束流没有分散，$\psi_{in}=0$. 由于 $\frac{e^{-\varepsilon_\perp}}{A}<1$,

(5.4-46) 式展开成

$$g(\varepsilon_\perp, 0) = (A-1)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{n}{A^n}e^{-n\varepsilon_\perp} \tag{5.4-47}$$

(5.4-41) 式和 (5.4-43) 式结合可以写为

$$\frac{\partial g}{\partial z} = \varepsilon_\perp \frac{\partial^2 g}{\partial \varepsilon_\perp^2} + \frac{\partial g}{\partial \varepsilon_\perp} \tag{5.4-48}$$

其中因子 $\frac{z_D}{2}$ 已被吸收于深度标度之中，也即是，z 是以 $\frac{z_D}{2}$ 为单位. 用拉普拉斯变换和初分布 (4.5-47) 式可解此方程,并且 (5.4-48) 式中只有一项因变换线性化需加以考虑. 于是，引入二维变换

$$\tilde{g}(\eta, s) = \iint_0^\infty g(\varepsilon_\perp, z)e^{-\varepsilon_\perp\eta - sz}d\varepsilon_\perp dz \tag{5.4-49}$$

并令 $g(\varepsilon_\perp, 0) = e^{-n\varepsilon_\perp}$，则方程 (5.4-48) 式变成

$$\eta^2\frac{d\tilde{g}(\eta, s)}{d\eta} + (s+\eta)\tilde{g}(\eta, s) = \frac{1}{\eta+n} \tag{5.4-50}$$

其解为

$$\tilde{g}(\eta, s) = \frac{1}{\eta n}e^{s\left(\frac{1}{\eta}+\frac{1}{n}\right)}E_1\left(s\left(\frac{1}{\eta}+\frac{1}{n}\right)\right) \tag{5.4-51}$$

式中

$$E_1(x) = \int_x^\infty \frac{e^{-u}}{u}du$$

取方程 (5.4-51) 式的逆变换

$$g(\varepsilon_\perp, z) = \frac{1}{zn+1}e^{-\frac{n\varepsilon_\perp}{zn+1}} \tag{5.4-52}$$

再回到同 z_D/z 的显函数关系,得到深度 z 的横能量分布是

$$g(\varepsilon_\perp, z) = (A-1)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{A^n}\frac{nz_D}{2nz+z_D} \cdot \exp\left(-\frac{nz_D\varepsilon_\perp}{2nz+z_D}\right) \tag{5.4-53}$$

以及在方阱近似下的产额是

$$\chi(z)=(A-1)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{A^{n}}\exp\left(-\frac{nz_D\varepsilon_{\perp}^{*}}{2nz+z_D}\right)\tag{5.4-54}$$

这个方程同（5.4-41）式一样适用于深度不深的情况。在这些深度内，产额的变化主要是由区域 $\varepsilon_{\perp}\simeq\varepsilon_{\perp}^{*}$ 的扩散。和扩散常数 z_D 决定的。更一般的情况是把方阱近似加到（5.4-40）式上 $(z=0)$，取 $A(\varepsilon_{\perp}^{*})=1$，经部分积分有

$$\left(\frac{d\chi}{dz}\right)_{z=0}=A(\varepsilon_{\perp}^{*})D(\varepsilon_{\perp}^{*})\left(\frac{\partial f}{\partial\varepsilon_{\perp}}\right)_{\varepsilon_{\perp}=\varepsilon_{\perp}^{*}}$$

$$\simeq D(\varepsilon_{\perp}^{*})\left(\frac{\partial g}{\partial\varepsilon_{\perp}}\right)_{\varepsilon_{\perp}=\varepsilon_{\perp}^{*}}\tag{5.4-55}$$

这对（5.4-48）式也成立。因此，深度浅时 z_D 可由

$$\frac{1}{z_D}=\frac{D(\varepsilon_{\perp}^{*})}{2\varepsilon_{\perp}^{*}}\tag{5.4-56}$$

确定，式中 $D(\varepsilon_{\perp}^{*})$ 由（5.4-39a）给出。因此，当离子进入晶体深

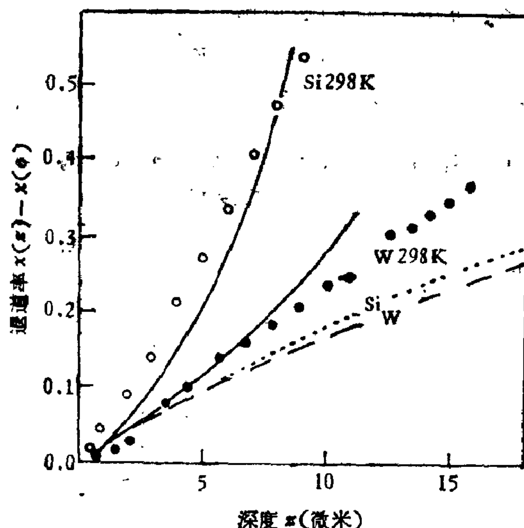


图 5.4-12 1.5 兆电子伏质子室温（298°K）在 Si⟨111⟩ 方向的退道率（○）[14] 3 兆电子伏质子在 W⟨100⟩ 方向的退道率（●）的实验结果同理论的比较[15]：实线包括了核和电子散射；点线（Si）和虚线（W）计算时只考虑核散射

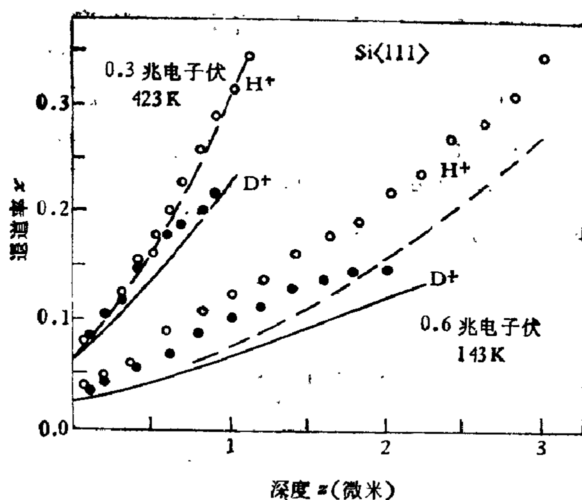


图 5.4-13　质子(○)和氘(●)在 Si⟨111⟩ 中实验的退道率同理论结果比较[1]

度很浅时，(5.4-54) 和 (5.4-56) 式可以很好近似地表达了产额随深度的变化关系。扩散方程的数值解法见本章附录。

图 5.4-12 和图 5.4-13 给出一些实验结果同理论计算的比较。在图 5.4-12 中有趣的是核散射和电子散射在不同的晶体中起着

表 5.4-1　不同势计算的电子密度之值 n_e 以及两相邻原子列之中点的势 U_s

系　　统	n_e(Å^{-3})		U_s (约化单位)		原子列数目***)
	莫雷尔*)	林哈德**)	莫雷尔	林哈德	
H⁺⟶Si⟨110⟩	0.077	0.039	0.09		6
	0.080		0.10	0.051	12
H⁺⟶Si⟨111⟩	0.14	0.093	0.0090		3
	0.14		0.0167		6
	0.15		0.0185	0.011	12
H⁺⟶Ge⟨110⟩	0.082		0.0564	0.0297	12
H⁺⟶Ge⟨111⟩	0.22		0.0132	0.0066	12

*) 用 (5.1-7) 式的莫勒尔势得到的值。
**) 用 (5.1-6) 式的林哈德势得到的值。
***) 指计算时用到沟道周围的原子列数目。

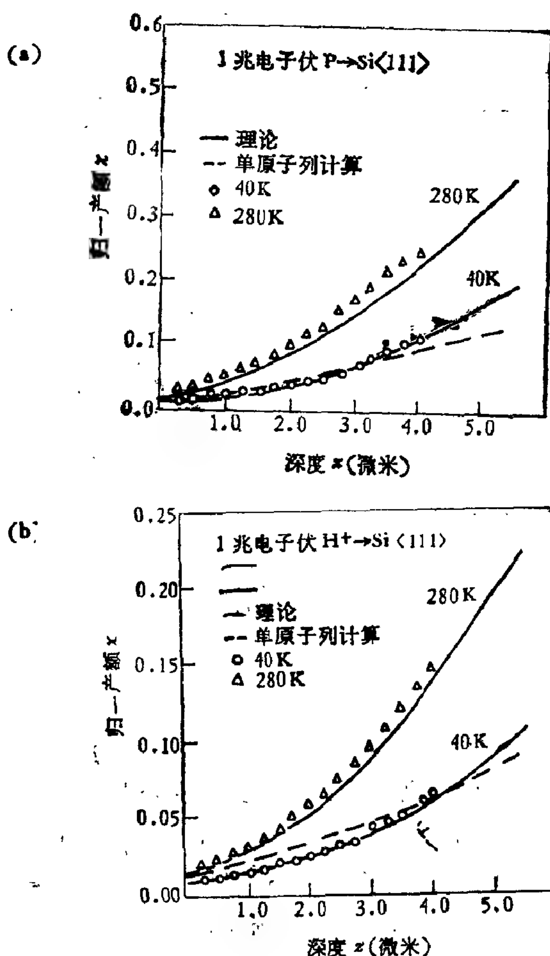


图 5.4-14 (a) 1.0 兆电子伏 H^+ 在 Si⟨111⟩ 沟道中产额 $\chi(z)$ 的温度关系．理论计算时取 $U_t=0.1$，$n_e=0.13\text{Å}^{-3}$ 和修正因子 $C_n=0.3$．(b) 1.0 兆电子伏 H^+ 在⟨110⟩沟道中的 $\chi(z)$ 随 z 变化的理论和实验值．虚线是单原子列近似

不同的作用[48]．即在束流能量一定且硅和钨中核贡献相同时，由于硅沟道中电子密度大引起的退道几率大，理论和实验符合很好．并且，在深度不大时，核阻止是主要的．图 5.4-13 利用电子散射截面同离子能量和速度有关而与质量无关的特点来测量电子引起退道的项．把相同能量的质子和氘的退道率之差就看成是电子散射

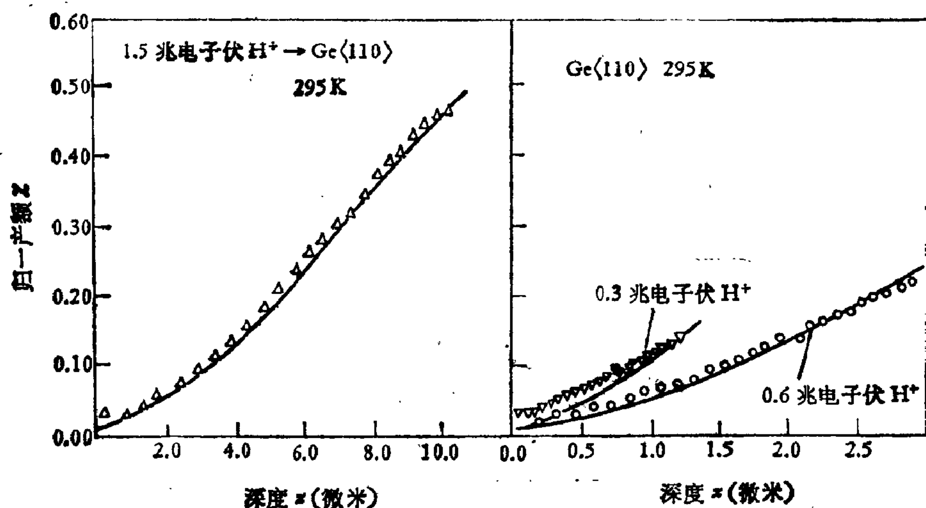


图 5.4-15(A) H^+ 在 Ge⟨110⟩ 沟道中退道率 $\chi(z)$ 同能量的关系，实线为理论值

的差别[49].

图 5.4-13 中的理论曲线是采用林哈德标准势计算的结果，可以看出实验值均比理论值高许多．如果采用最接近于真实原子间势(托马斯-费米)的莫雷尔势，即取 $U_t=0.1$，$n_e=0.13\,\text{Å}^{-3}$ 和 $C_e=0.3$ 计算 1 兆电子伏质子入射 Si⟨111⟩ 以及 $n_e=0.0\,\text{Å}^{-3}$ 计算 Si⟨110⟩ 沟道(见表 5.4-1) 的产额，与实验符合相当好[50]，如图 5.4-14 所示．图 5.4-15 示出质子入射到锗晶⟨110⟩沟道的退道的理论曲线同实验结果相比较，发现在 0.3 兆电子伏时两者符合不好．其原因可能是在低能时还有一些其它能量损失因素[如 (5.4-38) 式中的衰减项]变得比较重要，电子气体模型的适用性差些以及电子项的扩散函数在低能离子下对电子密度更敏感等因素造成的．

图 5.4-15 给出用稳定增加模型和扩散模型两种方法计算了质子在金刚石⟨110⟩沟道中的散射产额．显然，稳定增加模型同实验偏离较大，特别是当深度增加时，计算的产额增加很快，这是

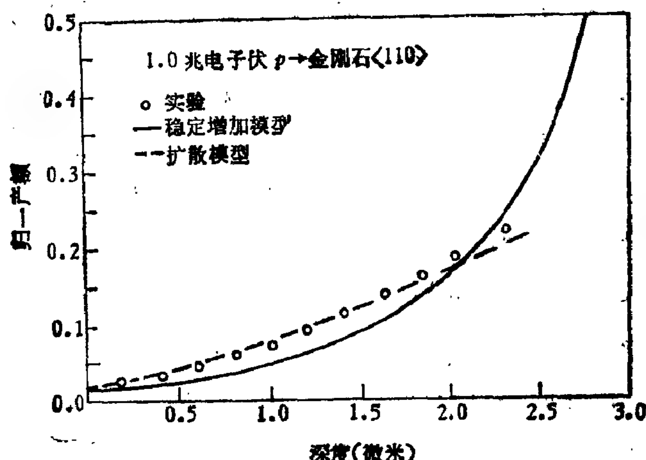


图 5.4-15(B) 稳定增加模型和扩散模型的比较

因为稳定增加模型只有在 $\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}$ 随 $\varepsilon_\perp$ 变化很快的情况下才成立；而金刚石中在 $\varepsilon_\perp < \varepsilon_\perp^*$ 时电子的作用是主要的，所以扩散的机理起决定作用。

六 晶体缺陷引起的退道

如果晶体中存在缺陷(如辐射损伤引起的位移原子、位错或迭式缺陷等)，就会使离子散射，产额增加。缺陷常常被看作是随机分布的，并可用方阱近似来作简化处理。在这个近似中，束流 $\varepsilon_\perp \leqslant \varepsilon_\perp^*$ 的部分被认为是沟道的，而把 $\varepsilon_\perp > \varepsilon_\perp^*$ 的部分看成是随机的。于是，退道产额的贡献有两部分：一是束流的随机部分的贡献 $\chi_R(z)$，它依赖于自表面到深度 z 处的缺陷浓度；另一是从深度 z 处缺陷直接散射的贡献。如果 $N_D(z)$ 是随机束从 z 处缺陷上背散射的几率，那么 z 处的总产额是

$$\chi_T(z) = \chi_R(z) + (1 - \chi_R(z))N_D(z) \qquad (5.4\text{-}57)$$

位错是一种扩展了的缺陷，因此具有大的退道效应，但直接产额的贡献较小，故有

$$\chi_T(z) = \chi_R(z)$$

随机产额 $\chi_R(z)$ 包括一直到深度 z 的缺陷使束流退道的贡献，理论上的主要问题是预言 $\chi_R(z)$。通常假定完美晶体中深度 z 处的产额 $\chi_V(z)$ 是已知的。然后分别不同情况采用三种模型：缺陷浓度小时用单散射模型，位移原子浓度大且随机分布时用多重散射模型，以及可以应用于各种浓度的复散射模型。

单散射模型运用于位移原子浓度小，或者散射截面大的情形$\left(\text{即是，大于一个沟道的“面积”}\ \frac{1}{Nd}\right)$，这时离子轨道扰动小而不需要考虑。离子被散射到大于 $\psi_{1/2}$ 的角度后就看作是退道了。假定缺陷的浓度是 $N_D(z)$ 以及散射到角度大于 $\psi_{1/2}$ 的截面是 σ_D，那么在深度 z 处束流被散射的部分是

$$P_s(z) = 1 - \exp\left[-\int_0^z N_D(z)\sigma_D dz\right] \qquad (5.4\text{-}58)$$

于是，由 (5.4-57) 式

$$\chi_R(z) = \chi_V(z) + [1 - \chi_V(z)]P_s(z) \qquad (5.4\text{-}59)$$

在多重散射和复散射模型中，可认为是束流沟道部分因缺陷多重散射使原来为 δ 分布展宽了一定的角度（通常是非晶层引起的）。如果深度 z 处多次或复散射分布是 $f(\psi, z)$，则束流被散射超过 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 的部分，即退道部分是

$$P_M(z) = \int_{\psi_{1/2}}^{\infty} \psi\, d\psi\, f(\psi, z) \qquad (5.4\text{-}60)$$

这样在 z 处的产额是

$$\chi_R(z) = \chi_V(z) + (1 - \chi_V(z))P_M(z) \qquad (5.4\text{-}61)$$

多重散射和复散射不同之点在于描述 $f(\psi, z)$ 上，

$$\int_0^z N_D(z)dz$$

多重散射模型假定它为角度均方偏差的高斯分布，从方程 (5.4-9) 积分得到。于是

$$P_M(z) = \exp\left(-\frac{\psi_{1/2}^2}{\Omega^2(z)}\right) \qquad (5.4\text{-}62)$$

这忽略了单次散射对分布尾巴的贡献，从而对缺陷浓度不高的产额估计过低。当然这种不足之处可用复散射模型来考虑[51]。

然而，缺陷引起多重散射或复散射模型均未考虑横能量的展宽．即认为沟道束只是由于缺陷散射而展宽的，而完美晶体中束流的退道部分单独处理．在多重散射模型中一个较好的近似是

$$\chi_R(z) = \exp\left(-\frac{\psi_{1/2}^2}{\Omega^2(z)+\Omega_V^2(z)}\right) \quad (5.4\text{-}63)$$

式中

$$\chi_V(z) = \exp\left(-\frac{\psi_{1/2}^2}{\Omega_V^2(z)}\right) \quad (5.4\text{-}63a)$$

给出 $\Omega_V^2(z)$ 的定义． 虽然这式把完美晶体中横能量随深度的变化看成是不变速率的变化，但它以相同的理论基础处理完整和损伤晶体中的扩散．类似的方法也可应用到复散射模型．

描述缺陷散射的最好方式还是把它们放在退道扩散模型中讨论． 一般是把通过角度小于某个截止角 ψ_{cut} 的散射包括在扩散项中，角度大于 ψ_{cut} 的散射属于单次散射项的贡献．通过角度大于 $\psi_{\text{cut}} \sim \psi_{\frac{1}{2}}$ 的散射要求小的碰撞参数，并且这些离子的反应函数可由缺陷原子在横平面中的分布 $P_D(r)$ 确定的，即是

$$\Pi_D(\varepsilon_\perp) = \frac{1}{A(\varepsilon_\perp)}\int_{U(r)\le E_\perp} P_D(r)d^2r$$

如果缺陷的截面是 σ_D，横能量分布由于单次散射所发生的变化是

$$\frac{\partial g(\varepsilon_\perp, z)}{\partial z} = -\sigma_D \Pi_D g(\varepsilon_\perp, z) \quad (5.4\text{-}64)$$

通过角度小于 ψ_{cut} 的散射是通过 $\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_D$ 的项对横能量随深度的变化率作贡献．于是，(5.4-38) 式的扩散方程变为

$$\frac{\partial f}{\partial z} = D_T\frac{\partial^2 f}{\partial \varepsilon_\perp^2} + \left(\frac{\partial \varepsilon_\perp}{\partial z}\right)_T \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_\perp} + \frac{\partial}{\partial \varepsilon_\perp}\left[A(\varepsilon_\perp) f\left(\frac{\partial \varepsilon_\perp}{\partial z}\right)_{\text{damp}}\right] - \sigma_D \Pi_D(\varepsilon_\perp) f(\varepsilon_\perp, z) \quad (5.4\text{-}65)$$

式中

$$\left(\frac{\partial \varepsilon_\perp}{\partial z}\right)_T = \frac{\partial \varepsilon_\perp}{\partial z} + \left(\frac{\partial \varepsilon_\perp}{\partial z}\right)_D$$

$$D_T(\varepsilon_\perp) = D(\varepsilon_\perp) + D_D(\varepsilon_\perp)$$

由于 (5.4-65) 式中包含了最后一项,横能量分布不再能归一化了,并且,离子吸收的部分是

$$\chi_A(z) = 1 - \int_0^\infty g(\varepsilon_\perp, z)dz$$

在深度 z 处的产额变成

$$\chi_R(z) = \int_0^\infty \Pi(\varepsilon_\perp)g(\varepsilon_\perp, z)d\varepsilon_\perp + \chi_A(z) \qquad (5.4\text{-}66)$$

这个方程可以应用到热振动原子引起的单次散射。若对散射角采用碰撞近似,则可确定大于 ψ_{cut} 的散射截面。于是,给出了散射角是碰撞参数 b 的函数

$$\psi(b) = -\frac{d}{2E}\frac{dU(r)}{dr}\bigg|_{r=b}$$

若在 r 小时采用 (5.1-13) 近似,则有

$$\psi(b) = \frac{Z_1Z_2e^2}{E}\frac{1}{b}$$

因此,截面得

$$\sigma = \Pi\left[\frac{Z_1Z_2e^2}{E}\right]^2\frac{1}{\psi_{\text{cut}}^2} \qquad (5.4\text{-}67)$$

把方程 (5.4-67)用到热振动散射,热振动原子分布同 $\varepsilon_\perp$ 的关系是由 (5.2-32) 式给出,于是

$$\sigma_T\Pi_T = \Pi\left[\frac{Z_1Z_2e^2}{E}\right]^2\frac{1}{\psi_{\text{cut}}^2}\exp\left[\frac{C^2a^2}{\rho_1^2}(Ae^{\varepsilon_\perp}-1)^{-1}\right]$$

$$(5.4\text{-}68)$$

方程 (5.4-65) 是扩散方程的完整形式,包括了吸收部分和衰减部分,选取合适的边界条件后,须进行数值解(参考本章"附录")。然后同方程 (5.4-39) 在 $A(\varepsilon_\perp) = 1$、$\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}$ 为常数以及单原子列模型的 $g(\varepsilon_\perp, 0)$ 等条件下得到的严格解 (5.4-54) 式加以

比较，发现误差仅为 0.1%。

实验上，若晶体密度 N，含有位移原子（随机的无序原子）密度 N_D，在深度 z 处的产额是

$$\chi(z)=\chi_R(z)+(1-\chi_R(z))\frac{N_D}{N} \tag{5.4-69}$$

式中 χ_R 是 z 处束流的随机成分，第二项代表不在晶格位置原子的直接背散射。不考虑通量峰效应。χ_R 依赖于表面和深度 z 之间的退道。在不知道引起退道的缺陷类型的情况下，可从单散射模型获得束流的随机部分，即用退道截面 σ_D 来描述缺陷。这个模型适合无序原子浓度比较小的情况，多重散射可以忽略。对于扩展型缺陷，如位错等，则有大的退道截面[51]。

根据单散射模型[52]

$$(1-\chi_R(z))=(1-\chi_V(z))e^{-N_D\sigma_D z} \tag{5.4-70}$$

式中 N_D 是缺陷密度，其截面为 σ_D，χ_P 是完整晶体在深度 z 处的产额。从方程 (5.4-69) 和 (5.4-70) 得到

$$\frac{1-\chi_D(z)}{1-\chi_V(z)}=e^{-N_D\sigma_D z}\left(1-\frac{N_D}{N}\right) \tag{5.4-71}$$

显然，除非 $\chi_D\approx\chi_P$，直接背散射的项只有在无序原子浓度

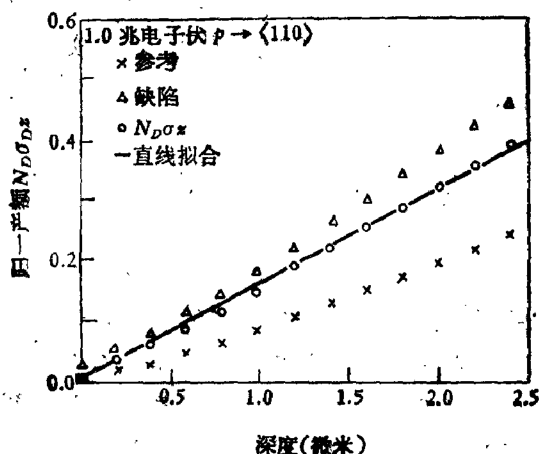


图 5.4-16 退道几率的确定 $N_D\sigma_D$

超过百分之几时才是重要的. 小于这个浓度就难以观察到. 如果是扩展型缺陷，退道截面大[51]，则可略去直接背散射，而从方程(5.4-71)得到

$$N_D\sigma_D z = \ln\left(\frac{1-\chi_V(z)}{1-\chi_D(z)}\right) \qquad (5.4-72)$$

$N_D\sigma_D$ 为单位长度的退道几率，可从实验结果拟合得到，如图 5.4-16 所示. 曲线给出与直线拟合的存在一些偏离，这可能是因为：(i) 缺陷改变了横能量的分布，也使一些离子退道. 使得深度增加时，退道产额增大. 这可以看成是小角多重散射，在计算扩散函数时须要知道缺陷的类型. 计算起来当然是很复杂的[53]. 但是，根据辐射损伤引起位移原子复散射分析可以给出位移原子密度同深度的线性关系. 扩展型缺陷可大大增加退道几率，因此，图 5.4-16 中的偏离可能是扩展型缺陷引起的多重散射造成的. (ii) 缺陷的退道截面依赖于横能量分布的细节，从而依赖于深度. 而 $N_D\sigma$ 的直线拟合只代表 σ 对深度的平均. (iii) 缺陷浓度可能是非均匀的. 这些都是实验和理论结果不一致的原因.

详细讨论缺陷退道效应显然与缺陷类型有关：例如，间隙原子和替代原子引起的退道不同，堆垛层错也是一种阻挡性退道，位错(特别是刃型位错)是一种变形退道，而晶体中的气泡则会引起复合退道，均是十分活跃的研究课题[53]. 部分实际应用我们将在下一章中讨论.

§ 5.5 表面非晶层对沟道的影响

测量沟道参数，例如最小产额、临界角及产额的深度关联均受表面非晶层的影响. 原来是准直很好的束流，经过非晶层就散射了，这样，离子进入晶体的入射角相对于原来入射方向的夹角有一定分布. 最小产额就增加了. 现在的产额就是对角度的平均.

我们之所以要研究非晶层的影响是因为晶体表面的非晶层经常存在，例如，表面氧化，真空系统中的气体凝结，离子注入引起的

辐射损伤等等。另外，这一研究对于用沟道方法探索晶体的无序情况以及退道效应本身也很重要。

在实验进行中，选择金刚石晶体表面分别蒸发碳层和铝层。在理论上采用复散射计算产额同厚度的关系。西格蒙德和温托邦(Winterbon)[54] 利用林哈德近似相互作用势讨论了几种角产额函数同约化厚度的关系，而产额的深度关联由退道的扩散模型计算得到。

从几百个千电子伏到几个兆电子伏能量离子的多重散和复散射可以用托马斯-费米概念来研究。其关键是林哈德给出的屏蔽库仑散射截面 (2.2-34) 公式

$$d\sigma = \pi a^2 \frac{dt}{2t^{3/2}} f(t^{1/2})$$

于是，离子穿过厚度为 x 的材料后的角分布是

$$F(x, \theta)d\Omega = \tilde{\theta}d\tilde{\theta}\int_0^\infty z\,dz\,J_0(\tilde{\theta}z)\exp[-\tau\Delta(z)]$$

$$= \tilde{\theta}d\tilde{\theta}f_1(\tau, \tilde{\theta}) \qquad (5.5\text{-}1)$$

式中

$$\Delta(z) = \int_0^\infty d\xi \frac{f(\xi)}{\xi^2}[1 - J_0(z\xi)]$$

这里，θ 是总散射角；x 是穿过层的厚度；$d\Omega$ 属于 θ 角的立体角，J_0 是零阶贝塞耳函数。$\tilde{\theta}$ 和 τ 是无量纲变量，定义为

$$\tau = \pi a^2 N x$$

$$\tilde{\theta} = \frac{Ea}{2Z_1Z_2e^2}\theta \qquad (5.5\text{-}2)$$

因此，整个靶和离子组合系统中，多重散射分布仅是变量 τ 和 $\tilde{\theta}$ 的函数。

(5.5-1) 式中的分布 f_1 是归一化的，即

$$\int_0^\infty f_1(\tau, \tilde{\theta})\tilde{\theta}d\tilde{\theta} = \int F(x, \theta)d\Omega = 1$$

对于薄层，这种分布就趋于单次散射的分布，也即

$$\lim_{x\to 0} F(x, \theta)d\Omega \to N_x d\sigma(\theta), \quad \theta \neq 0$$

或者用无量纲变量

$$\lim_{\tau\to 0}\frac{\tilde{\theta}^3}{\tau}f_1(\tau,\tilde{\theta})=f(\tilde{\theta}) \tag{5.5-3}$$

可算出分布 $f_1(\tau,\tilde{\theta})$ 并列成表(参见文献 [54]).

用幂数势

$$V(r)\propto r^{1/s}$$

推出的截面可近似表示托马斯-费米截面,给出

$$f(\xi)=\lambda\xi^{1-2s} \tag{5.5-4}$$

在 ξ 的某些范围内,λ 依赖于 s. 利用 (5.5-4) 式,函数 $\tilde{\theta}f_1(\tau,\tilde{\theta})$ 是一个变量 $\frac{\tilde{\theta}^{2s}}{c\tau}$ 的函数,c 依赖于 s. 对于某些 s 值可求出分布的解析形式. 一般情况可表示成幂级数,幂级数取和当然要比方程 (5.5-1) 的积分容易得多了.

对表面没有覆盖的晶体,接近轴沟道的产额依赖于轴方向的极角 ψ 和方位角 ϕ(与沟道相交的参考平面). 如果晶体表面有一个非晶层,束流被多重散射,具有分布 $F(x,\psi)$,且在沟道方向的产额变为

$$\chi_L(x)=\int F(x,\psi)\chi(\psi,\phi)d\Omega$$

这里 $\chi(\psi,\phi)$ 是表面没有覆盖层测量产额. 对方位角积分得

$$\chi_L(x)=2\pi\int_0^\infty F(x,\psi)\chi(\psi)\psi d\psi$$

$\chi(\psi)$ 是对方位角平均的角产额. 上式还可写成托马斯-费米无量纲变量

$$\chi_L(\tau)=\int_0^\infty f_1(\tau,\tilde{\theta})\chi(\tilde{\theta})\tilde{\theta}d\tilde{\theta} \tag{5.5-5}$$

于是,覆盖晶体上 0° 处的产额可用多重散射分布加上非覆盖晶体实验测得角产额来确定. 这个关系对所有的深度均成立. 因此,把 0° 产额同深度的关系可用测量角产额同深度关系来确定.

有时用方阱近似来表达 $\chi(\psi)$ 这时产额为

$$\chi(\psi)=\chi(0)\quad \psi\leqslant\psi_{\frac{1}{2}} \tag{5.5-6}$$

$$=1\qquad \psi>\psi_{1/2}$$

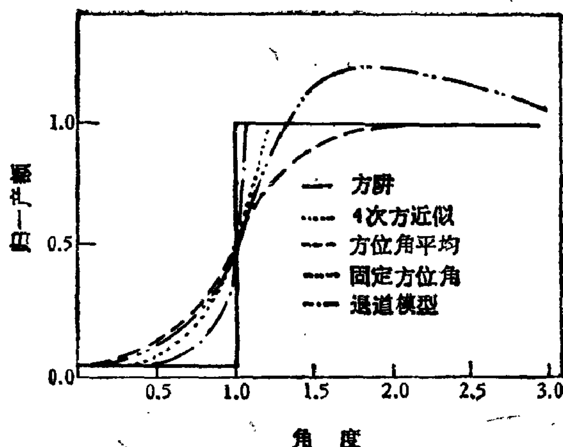


图 5.5-1 各种近似下归一产额的角关联

有了这个角产额函数的定义，覆盖晶体的产额是

$$\chi_L(\tau)=\chi(0)+(1-\chi(0))P(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}},\tau) \qquad (5.5\text{-}6a)$$

式中

$$P(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}},\tau)=\int_{\tilde{\theta}_{1/2}}^{\infty} f_1(\tilde{\theta},\tau)\tilde{\theta}d\tilde{\theta} \qquad (5.5\text{-}6b)$$

取另外一种四次方近似更符合角产额

$$\chi(\psi)=\chi(0)+[1-\chi(0)]\frac{\psi^4}{2\psi_{1/2}^4},\quad \psi\leqslant 2^{\frac{1}{4}}\psi_{\frac{1}{2}} \qquad (5.5\text{-}7)$$

$$=1,\qquad \psi>2^{\frac{1}{4}}\psi_{\frac{1}{2}}$$

图 5.5-1 给出这三种角产额函数［即 (5.5-5)、(5.5-6) 和 (5.5-7) 三式］，同时还给出了退道所得到产额角关联.

利用扩散模型计算角关联时，多重散射使横能量发生变化，多重散射的分布可用约化能量 $\varepsilon_\perp$ 来表示

$$f_1'(\tau,\varepsilon_\perp)=\frac{\tilde{\theta}_{1/2}^2}{2\varepsilon_{\perp\frac{1}{2}}}f_1(\tau,\tilde{\theta}^2)$$

式中

$$\varepsilon_{\perp\frac{1}{2}}=2\frac{\psi_{1/2}^2}{\psi_1^2}$$

在这个定义中有

$$\int_0^{\infty} f_1'(\tau,\varepsilon_\perp)d\varepsilon_\perp=1$$

方程 (5.4-68) 变成

$$\chi_L(\tau)=\int_0^{\infty} f_1'(\tau,\varepsilon_\perp)\chi(\varepsilon_\perp)d\varepsilon_\perp$$

从方程 (5.2-11) 有

$$\chi(\varepsilon_\perp)=\int_0^{\infty} g(\varepsilon'_\perp-\varepsilon_\perp)\Pi(\varepsilon'_\perp)d\varepsilon'_\perp$$

于是

$$\begin{aligned}\chi_L(\tau)&=\int_0^{\infty} f_1'(\tau,\varepsilon_\perp)g(\varepsilon'_\perp-\varepsilon_\perp)\Pi(\varepsilon'_\perp)d\varepsilon'_\perp d\varepsilon_\perp\\&=\int_0^{\infty} g_L(\tau,\varepsilon'_\perp)\Pi(\varepsilon'_\perp)d\varepsilon'_\perp\end{aligned}$$

式中

$$g_L(\tau,\varepsilon'_\perp)=\int_0^{\infty} f_1'(\tau,\varepsilon_\perp)g(\varepsilon'_\perp-\varepsilon_\perp)d\varepsilon_\perp \qquad (5.5\text{-}8)$$

是覆盖晶体的初横能量分布。利用 (5.5-8) 式可解扩散方程，从而给出覆盖晶体上产额同深度的关系(图 5.5-2)。

图 5.5-2(a) 和 (b) 是表面的最小产额 $\chi_{\min}$ 同 τ 的关系，分别对应于金刚石表面覆盖碳和铝。理论曲线是由托马斯-费米多重散射分布计算的[54]. 在理论计算中采用了上述的三种近似：方位角平均[(5.5-5)式]，方阱近似[(5.5-6)式]以及 4 次幂近似 [(5.5-7)式].

(5.5-5) 式的积分是用约化散射角 $\tilde{\theta}$ 进行的 [方程 (5.5-2)]，它与能量有关. 所取的能量是散射发生处的束流平均能量；这可以写成 $E_0-\frac{1}{2}\Delta E$，其中 E_0 是初能量，ΔE 是层的能量损失. 对薄层来说，这是一个很好的近似. 选取适合 $\phi_{\frac{1}{2}}$ 的能量为 $E_0-\Delta E$，则有

$$\begin{aligned}\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}(E_0-\Delta E)&=\frac{a}{2Z_1Z_2e^2}\left[E_0-\frac{1}{2}\Delta E\right]\phi_{\frac{1}{2}}(E_0-\Delta E)\\&=\frac{a}{2Z_1Z_2e^2}\left[E_0-\frac{1}{2}\Delta E\right]\frac{E_0^{1/2}}{[E_0-\Delta E]^{1/2}}\phi_{\frac{1}{2}}(E_0)\end{aligned}$$

按 $\frac{\Delta E}{E_0}$ 展开并取一级近似，

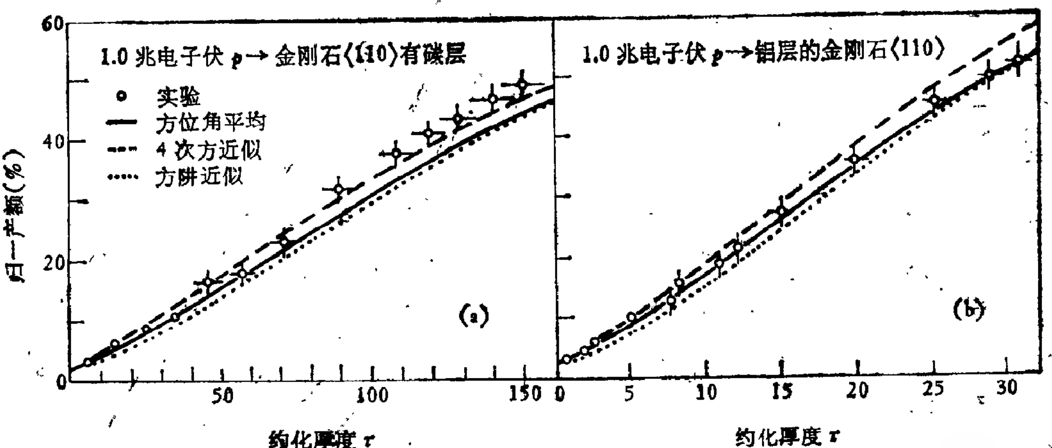


图 5.5-2 金刚石晶体表面复有非晶层(a)碳(b)铝的归一产额同约化厚度的关系．实验结果取自文献[13]

$$\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}(E_0-\Delta E)=\frac{a}{2Z_1Z_2e^2}E_0\phi_{\frac{1}{2}}(E_0)=\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}(E_0)$$

因此，在薄层情况下，利用入射能量测得的临界角，而忽略该层的能量损失是一个很好的近似. 一般来说，还是用有理函数来拟合多重散射分布，这种有理函数和真实分布 $\left(\sim\frac{\tau}{\tilde{\theta}^4}\right)$ 一样有大角特性，而 (5.5-5) 式则要进行数值解. 理论计算的曲线也绘于图 5.5-2.

根据方位角平均计算的理论产额曲线同实验符合得很好，误差在 10% 以内，最大的偏差是覆盖碳的情形. 另外两种近似模型也得到较好的结果，特别是在产额低时同四次幂近似符合得也很好. 图 5.5-2(a) 中四次幂近似同碳覆盖情况符合得最好，这表明角产额函数更接近于四次幂的形状，但这并不能说明角产额剖面

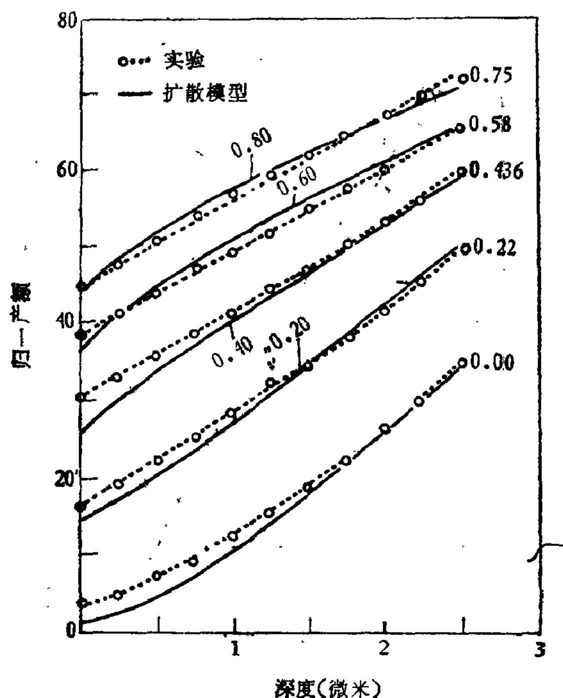


图 5.5-3 各种不同厚度 τ 的金覆盖层时实验和理论归一产额同深度的关系

应该依赖于覆盖层的特性．一种可能的解释是建立在托马斯-费米统计考虑的原子间势对电子和质子比较少的轻原子(如碳)不是严格适用的，即是托马斯-费米统计所提供原子间势的屏蔽效应太多了一点，靶原子核中质子对核势的直接影响加大了，从而使散射加多，产额增高．

选择不同厚度覆盖层的样品，如在金刚石晶体表面蒸发不同厚度非晶的金薄膜，测得退道归一产额随深度的变化，再同扩散模型计算结果相比较，如图 5.5-3 所示．理论和实验值符合得相当好，说明扩散模型应用在晶体表面覆盖非晶层仍能适用．但深度为零的表面层实验值较高，而在图 5.5-2 中表层的实验值同理论值更接近．一种可能的原因是未覆盖金刚石表面不是完整的．扩散模型对于这种不完整性比较灵敏之故．

最后，我们讨论一下晶体表面沾有一层很薄的污染层对产额的影响，这在实际应用沟道效应研究问题时经常遇到．我们给出一个简单的，精确度相当好的描述薄污染层效应的关系式．

当薄层厚度 $\tau \to 0$ 时，由方程 (5.5-3) 得到多重散射的近似分布

$$f_1(\tau, \tilde{\theta}) \approx \frac{\tau}{\tilde{\theta}^3} f(\tilde{\theta}) \tag{5.5-9}$$

当 $\tilde{\theta}$ 大时，

$$f(\tilde{\theta}) \approx \frac{1}{2\tilde{\theta}}$$

利用角产额函数的方阱近似[(5.5-6)式]，晶体表面盖有薄层的产额为

$$\chi_L(\tau) = \chi(0) + (1 - \chi(0)) P_s(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}, \tau)$$

及

$$P_s(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}, \tau) = \int_{\tilde{\theta}_{1/2}}^{\infty} \frac{\tau}{2\tilde{\theta}^4} \tilde{\theta} d\tilde{\theta} = \frac{\tau}{4\tilde{\theta}_{1/2}^2}$$

因此，

$$\Delta\chi = \chi_L(\tau) - \chi(0)$$

$$= (1 - \chi(0)) \frac{\tau}{4\tilde{\theta}_{1/2}^2} \approx \frac{\tau}{4\tilde{\theta}_{1/2}^2} \tag{5.5-10}$$

回到无标度的形式，有

$$\Delta\chi = \pi N x \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{E}\right)^2 \frac{1}{\psi_{1/2}^2} \qquad (5.5\text{-}10a)$$

如果利用卢瑟福散射截面公式(1.3-11)

$$\sigma = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E}\right)^2 F(\theta, M_1, M_2) \qquad (5.5\text{-}11)$$

及

$$F(\theta, M_1 M_2) = \frac{4\left[\cos\theta + \left[1 - \left(\frac{M_1}{M_2}\sin\theta\right)^2\right]^{1/2}\right]^2}{\sin^4\theta\left[1 - \left(\frac{M_1}{M_2}\sin\theta\right)^2\right]^{1/2}}$$

式中 E 和 θ 是实验室坐标系的能量和角度，M_1 和 M_2 分别为入射离子和靶原子质量，(5.5-10a) 式变成

$$\Delta\chi = 16\pi \frac{1}{\psi_{1/2}^2} \frac{C}{n F(\theta, M_1, M_2) d\Omega} \qquad (5.5\text{-}12)$$

式中 n 为入射粒子数目，C 为背散射粒子的数目，可以从

$$N_x = \frac{C}{n\sigma d\Omega} \qquad (5.5\text{-}13)$$

得到，N_x 是层的面密度（即密度 N 乘以厚度 x）. 对于 $M_1 \ll M$ 的情形

$$F(\theta, M_1, M_2) \approx \sin^{-4}\frac{\theta}{2} \qquad (5.5\text{-}14)$$

于是

$$\Delta\chi = 16 \frac{1}{\psi_{1/2}^2} \frac{C}{n d\Omega} \frac{1}{\sin^4\theta/L} \qquad (5.5\text{-}15)$$

当轻离子通过重杂质层入射到晶体上，最小产额的增加仅依赖于谱中背散射离子的计数，而同覆盖层的元素特性无关.

诚然，这里 $f(\tilde{\theta})$ 作的近似是很粗糙的，误差是很肯定的，特别是对于比较重的原子层，这时 $\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}$ 近似 $\lesssim 1$. 但是，方程(5.5-15)给出了有用的初略估计，预言了质量同薄层对产额影响无关. (5.5-14)式在 He^+ 入射到碳层上误差约 25%，方程 (5.5-15) 是可以应用的. 如果是质子入射到轻的杂质层(如碳和氧)，散射截面不再是卢瑟福截面，方程 (5.5-15) 不再能用. 但方程 (5.5-10) 及

(5.5-10a) 是能用的

要想得到比较好的结果一方面需要选用托马斯-费米截面较好的近似式，另一方面可用四次幂近似来表示角产额函数. 截面上的近似表达式常用幂规律截面来对托马斯-费米截面进行分段近似描述，即

$$
\begin{aligned}
f(\tilde{\theta}) &= \frac{1}{2\tilde{\theta}} & \tilde{\theta} > 1.53 \\
&= 0.327 & 0.0156 \leqslant \tilde{\theta} \leqslant 1.53 \quad (5.5\text{-}16) \\
&= 1.309\tilde{\theta}^{1/3} & \tilde{\theta} < 0.0156
\end{aligned}
$$

再利用角产额函数的四次幂近似和方程 (5.5-9)，得到产额

$$\chi_L(\tau) = \chi(0) + (1 - \chi(0))P(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}, \tau) \qquad (5.5\text{-}17)$$

及

$$
\begin{aligned}
P(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}, \tau) &= \left(\frac{0.349}{\tilde{\theta}_{1/2}^{2/3}} + 20.8\right)\tau, \qquad \tilde{\theta}_{\frac{1}{2}} < 0.0131 \\
&= \left(\frac{0.367}{\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}} - 0.107 - \frac{2.06 \cdot 10^{-8}}{\tilde{\theta}_{1/2}^{4}}\right)\tau, \\
&\qquad 0.0131 \leqslant \tilde{\theta}_{\frac{1}{2}} \leqslant 1.29 \\
&= \left(\frac{0.354}{\tilde{\theta}_{1/2}^{2}} - \frac{0.098}{\tilde{\theta}_{1/2}^{4}}\right)\tau \qquad \tilde{\theta}_{\frac{1}{2}} > 1.29 \quad (5.5\text{-}17a)
\end{aligned}
$$

图 5.5-4 给出金刚石晶体上有厚度很薄的碳、铝和金的三种非晶层的实验结果，以及方程 (5.5-10) 和 (5.5-17) 计算结果. 很清

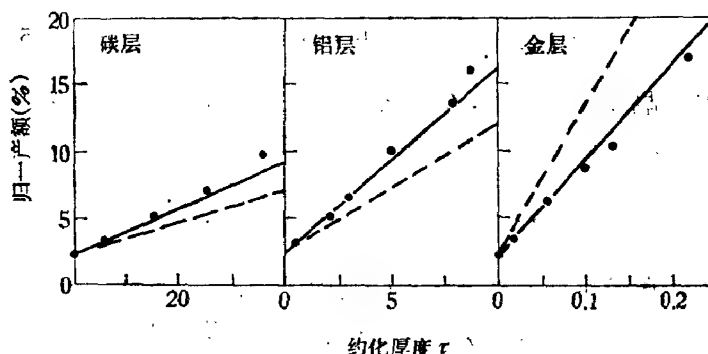


图 5.5-4 金刚石晶体表面复有 C、Al 和 Au 薄层的实验和计算结果

楚，林哈德表示式（5.5-10a）只能给出产额实际增加的近似估计，最好的情况是碳，此时临界角 $\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}=4.3$。方程（5.5-17）得到的结果同实验符合更好，对碳层 $\Delta\chi$ 约为 0.05，而铝和金为 $\Delta\chi=0.1$。所以方程（5.5-17）可以很好地描述薄的非晶杂质层或污染层对最小产额的影响。

§5.6 平面退道

当离子在晶体主平面方向运动时，由于其在横平面内的运动类似于一维谐振子，故其统计平衡的空间分布是不均匀的。在连续模型近似下，它依赖于到平面的距离 y，并且平衡几率分布由（5.2-5）式给出

$$P_{s}(E_{\perp}, y)=\frac{C(E_{\perp})}{d_{p}}\left(\frac{E_{\perp}}{E_{\perp}-U_{p}(y)}\right)$$

平面势是距离的平滑函数，因此，两个原子平面均应该考虑。如果只考虑围绕沟道的两个原子平面的贡献，那么作用在离子上的势是

$$U_{p}(y)=U_{1}(y)+U_{1}(d_{p}-y)-2U_{1}(d_{p}/2) \qquad (5.6-1)$$

利用林哈德连续势（5.1-35）式有

$$U_{1}(y)=2\pi Z_{1}Z_{2}e^{2}Nd_{p}Ca\left[\sqrt{\left(\frac{y}{Ca}\right)^{2}+1}-\frac{y}{Ca}\right]$$

$$\equiv U_{oc}\left[\sqrt{\left(\frac{y}{Ca}\right)^{2}+1}-\frac{y}{Ca}\right] \qquad (5.6-2)$$

这里 N 是晶体原子密度，$C=\sqrt{3}$。由图 5.1-11 可看出，$U_{p}(y)$ 在沟道中心可近似为一个谐振势（图 5.1-11 的虚线所示），

$$U_{2}(y)=U_{oc}(2a/d_{p})^{3}C\left(\frac{y}{a}-\frac{d_{p}}{2a}\right)^{2} \qquad (5.6-3)$$

而在靠近原子平面时才会考虑较高阶的项。

知道了两个势 $U_{p}(y)$ 和几率分布 $P_{s}(E_{\perp}, y)$，就可求出每单位长度上横能量对取样区域取平均的变化。从振动原子核的贡

献得到

$$\delta\langle E_\perp\rangle = \delta z \frac{d}{4E_0}\langle\{\delta \mathbf{k}(\mathbf{r})\}^2\rangle$$

$$= \delta z \frac{(Nd_p)^{1/2}}{4E_0}\frac{\rho_p^2}{2}\langle\{k'(y)\}^2\rangle \qquad (5.6-4)$$

其中 $k = -\frac{dU_p}{dy}$、$k' = -\frac{d^2U_p}{dy^2}$，而 $\rho_p^2 = \frac{1}{2}\rho_2^2 = \frac{1}{3}\langle\rho^2\rangle$ 为垂直于原子平面的晶格均方振幅．在谐振近似下，k' 是常数，方程(5.6-4) 变成

$$\delta\langle E_\perp\rangle_n = \delta z \frac{(Nd_p)^{1/2}}{8E_0}\rho_p^2\left\{U_{oc}\left(\frac{z}{d_p}\right)^3 Ca\right\}^2 \qquad (5.6-5)$$

电子散射的贡献是

$$\delta\langle E_\perp\rangle_e = \frac{1}{2}\delta z \frac{m_e}{2M_1}S_e\langle\rho_e(\mathbf{r})\rangle = \delta_z \frac{\pi Z_1^2 e^4}{2E_0}L_e\langle\rho_e(y)\rangle \quad (5.6-6)$$

式中引入了 $\frac{1}{2}$，是因为平行于平面的展宽对平面逷道没 有 影 响．在谐振近似下，得到

$$\delta\langle E_\perp\rangle_e = \delta z \frac{\pi Z_1^2 e^4}{2E_0}L_e\left\{U_{oc}\left(\frac{2}{d_p}\right)^3 Ca\right\}^2 \qquad (5.6-7)$$

用无量纲的约化横能量 $\varepsilon_\perp^p = E_\perp/U_{oc}$ 来表示上述两个过程引起每单位长度的平均变化，并把同晶体参数和束流参数有关的部分分开：

$$\delta\langle\varepsilon_\perp^p\rangle = \delta\langle\varepsilon_\perp^p\rangle_n + \delta\langle\varepsilon_\perp^p\rangle_e$$

表 5.6-1 系数 $A_n^p(E_0, T)$ 和 $B_e^p(E_0, v)$ 的值(单位是微米$^{-1}$)[15]

束 流 和 靶	A_n^p[相对不同的晶体温度(K)]*)				B_e^p[相对于束流能量兆电子伏]			
	80	140	300	420	0.3	0.6	1.0	1.5
$H^+ \longrightarrow$ Si(110)	0.12	0.15	0.21	0.24	1.04	0.73	0.53	0.41
$D^+ \longrightarrow$ Si(110)	0.12	0.15	0.21	0.24	0.60	0.52	0.40	0.32
$H^+ \longrightarrow$ Ge(110)	0.48	0.62	0.80	0.84	0.72	0.70	0.58	0.46

*) 均方振幅是用德拜 (Debye) 模型计算的．

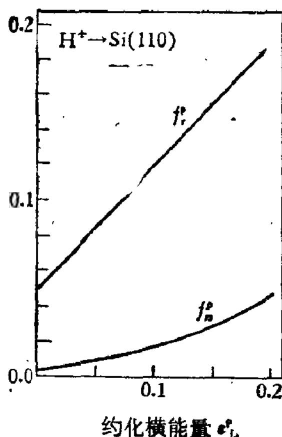


图 5.6-1 质子在 Si(110) 中核 f_n^p 和电子 f_e^p 变化同约化横能量的关系[13]

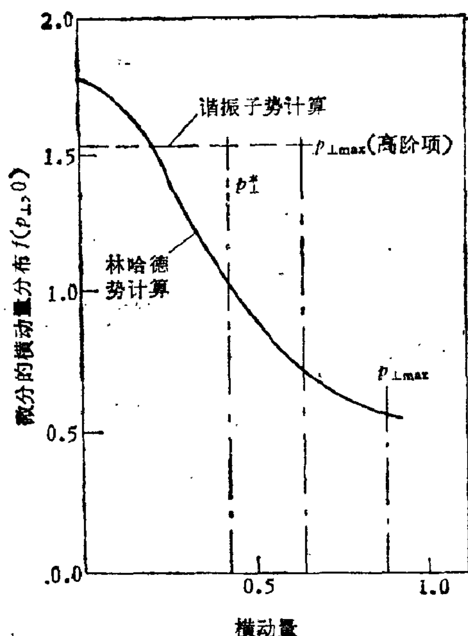


图 5.6-2 由林哈德势 $U_p(y)$ 计算质子进入 Si(110) 平面沟道的微分横动量分布．图中虚线是谐振子势计算得到的

$$= A_n^p(E_0,T)f_n^p(\varepsilon_\perp^p) + B_e^p(E_0,v)f_e^p(\varepsilon_\perp^p)$$

函数 $f_n(\varepsilon_\perp^p)$ 和 $f_e(\varepsilon_\perp^p)$ 绘于图 5.6-1，系数 A_n^p 和 B_e^p 的一些典型结果列于表 5.6-1． 在平面沟道的情况下电子阻尼比核阻尼的贡献重要得多．而且，$\delta\langle\varepsilon_\perp^p\rangle/\delta z$ 是 $\varepsilon_\perp^p$ 的平滑函数；于是

$$\frac{\delta\langle E_\perp\rangle}{\delta z} = \frac{\delta\langle E_\perp\rangle_n + \delta\langle E_\perp\rangle_e}{\delta z} = \frac{1}{M_1}\frac{d}{dP_\perp}\{P_\perp D(P_\perp)\}$$

$$\frac{D(P_\perp)}{M_1} = \frac{U_{oc}}{P_\perp}\int_0^{P_\perp}(A_n^p f_n^p + B_e^p f_e^p)dP' \qquad (5.6\text{-}8)$$

在硅和锗的主平面中，电子密度数量级大约每个原子有三个电子，因此散射是由价电子引起的．这种假定给出电子密度是接近一个常数，并且方程 (5.6-5) 和 (5.6-7) 成立．因此，扩散系数 (5.6-8) 与横动量无关，即 $D(P_\perp) = D_0$．选取适当的边界条件：

$$f(P_\perp, 0) = f(P_{\perp 0}), \quad f(P_\perp^*, z) = 0 \tag{5.6-9}$$

(5.4-40) 的扩散方程可以得到分析解.式中 $P_\perp^* = \sqrt{2M_1}\,\psi_P\sqrt{E_0}$，$\psi_p$ 是平面沟道的临界角，由 (5.1-38) 式给出. $P_\perp^*$ 意味着略去二次过程,即是，退道离子会因多次碰撞跑到沟道中去(即 feeding-in 过程). $f(P_{\perp 0})$为在穿过晶体表面时被平面势所偏转的离子的横动量分布. 计算 $f(P_{\perp 0})$ 需要利用能量守恒，即具有横能量 $E_{\perp 0} \to E_{\perp 0} + dE_\perp$ 的部分入射离子 dn 等于进入平面沟道离原子平面距离为 $y \to y + dy$ 的离子,其中 $E_{\perp 0} = U(y)$，即

$$dn = \frac{dn}{dE_{\perp 0}} dE_{\perp 0} = \frac{dy}{d_{\frac{p}{2}}} = f(E_{\perp 0})$$

变成横动量表示

$$dn = f(P_{\perp 0})dP_{\perp 0}, \quad f(P_{\perp 0}) = \frac{2}{d_p}\left(\frac{dP_\perp}{dy}\right)^{-1} \tag{5.6-10}$$

在谐振势的近似中得到对入射束归一常数

$$n_0 = \frac{2a}{d_p}\left(2M_1 C U_{oc}\left(\frac{2a}{d_p}\right)^3\right)^{-\frac{1}{2}}; \quad \int_0^{P_{\max}} f(P_{\perp 0})d_{p\perp 0} = 1 \tag{5.6-11}$$

式中 $P_{\perp\max}$ 是粒子进入最大势处的横动量 $U_p(0) = \frac{P_{\perp\max}^2}{2M_1}$. 如果考虑势的高阶项,那么 $f(P_{\perp 0})$ 随 $P_{\perp 0}$ 缓慢变化,如图 5.6-2.

由 $D(P_\perp) = D_0$ 得到的平面沟道的扩散方程是

$$\frac{\partial}{\partial z} f(P_\perp; z) = D_0 \frac{\partial^2}{\partial P_\perp^2} f(P_\perp, z) \tag{5.6-12}$$

由上述边界条件给出此式的解为

$$f(P_\perp, z) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin n\pi\left(\frac{P_\perp + P_\perp^*}{2P_\perp^2}\right) \cdot \exp\left(-\frac{\pi^2 n^2}{8M_1U_{oc}}\frac{D_0 z}{P_\perp^{*2}}\right) \tag{5.6-13}$$

其系数为

$$a_n = \frac{1}{P_\perp^*}\int_0^{P_\perp^*} f(P_\perp, 0)\sin n\pi\left(\frac{P_\perp + P_\perp^*}{2P_\perp^*}\right)dP_\perp \tag{5.6-14}$$

是确定的.

在深度 z 处的沟道部分为

$$1-\chi(z)=\int_0^{P_\perp^*} f(P_\perp, z)dP_\perp = n(z). \qquad (5.6\text{-}15)$$

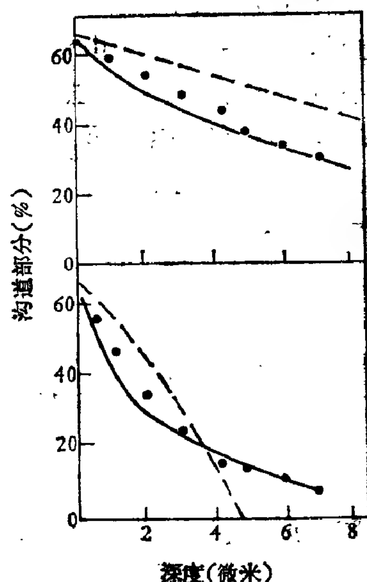


图 5.6-3 质子在 Si(110) 面沟道中的沟道分数实验和理论结果. 实线为扩散模型，虚线为稳定增加模型计算的. 后者偏离较大[36]

在谐振势近似下 $z=0$ 处有:

$$1-\chi(0)=n(0)=\int_0^{P_\perp^*} n_0 dP_\perp$$

$$=\frac{P_\perp^*}{P_{\perp\max}}\approx\frac{2}{3} \qquad (5.6\text{-}16)$$

并示于图 5.6-2. 当 z 大时，只有级数的第一项起主要作用，于是

$$1-\chi(z)=n(z)\propto\exp\left(-\frac{D_0 z}{P_\perp^{*2}}\right) \qquad (5.6\text{-}17)$$

这里 D_0 随束流入射能量 E_0 的增加而减少，这是因为 E_0 高时多重散射减少了 [见 (5.6-4) 式和 (5.6-6) 式]，在不考虑 L_e 因子同能量关系时有

$$D_0\propto\frac{1}{E_0}$$

图 5.6-3 给出上述理论计算结果，同实验符合很好，束流沟道部分

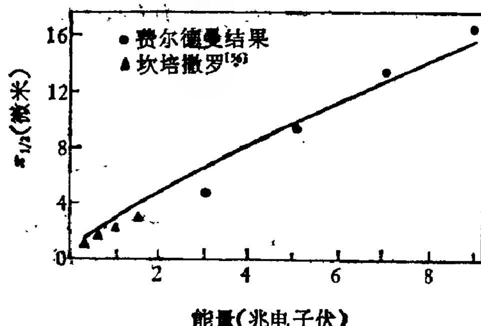


图 5.6-4 质子在 Si(110) 面中平面退道半厚度 $z_{\frac{1}{2}}$ 与入射粒子能量的关系. 其中标记● 为文献: L. C. Feldman, et al., *Brookhaven National Laboratory Report*, 50083, 58 (1967).

$(1-\chi(z))$ 随深度 z 的变化是指数关系，并以 $\frac{1}{E_0}$ 为标度.

同实验结果比较，得到

$$(1-\chi(z))=(1-\chi(0))e^{-0.693\frac{z}{z_{\frac{1}{2}}}} \tag{5.6-18}$$

式中 $z_{\frac{1}{2}}$ 为退道半厚度. 图 5.6-4 给出退道半厚度同入射粒子能量的关系

附录 扩散方程的数值解

(5.4-65) 式为完整的“扩散”方程，包括吸收和衰减项，应数值解.

为了得到固定的边界条件，引入如下变换

$$\varepsilon_{\perp}=\varepsilon_m\tan^2\left(\frac{\pi}{2}y\right)$$

ε_m 是常数以获取变换的标度，且在 $y=\frac{1}{2}$ 时 $\varepsilon_{\perp}=\varepsilon_m$. 于是方程 (5.4-65) 变成

$$\frac{\partial f}{\partial z}=D_1\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}+D_2\frac{\partial f}{\partial y}+D_3 f \tag{A}$$

且

$$f=f(y,z)=\frac{g(y,z)}{A(y)};\quad f(\pm 1)=0$$

和

$$D_1=\frac{1}{4\varepsilon_m^2}\frac{\cos^4\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)}{\tan^2\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)}D(\varepsilon_{\perp}(y))$$

$$D_2=\frac{1}{2\varepsilon_m}[S(\varepsilon_{\perp}(y))+S_d(\varepsilon_{\perp}(y))]\frac{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)}{\tan\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)}$$

$$
-\frac{D(\varepsilon_\perp(y))}{4\varepsilon_m^2}\frac{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)}{\tan\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)}\left[2\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)\right.
$$

$$
\left.+\cot^2\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)\right]
$$

$$
D_3=\frac{1}{2\varepsilon_m}\frac{\cos^2\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)}{\tan\left(\frac{\pi}{2}\cdot y\right)}\frac{dS_d(\varepsilon_\perp(y))}{dy}-\sigma_T\Pi_T(\varepsilon_\perp(y))
$$

式中

$$
S(\varepsilon_\perp)=\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}
$$

$$
S_d(\varepsilon_\perp)=A(\varepsilon_\perp)\left(\frac{d\varepsilon_\perp}{dz}\right)_{\text{damp}}
$$

而且通过 (5.4-41a) 和 (5.4-43) 式把 $D(\varepsilon_\perp)$ 和 $S(\varepsilon_\perp)$ 联系起来。在边界条件为 $f(\pm 1)=0$ 时可解此方程得到 f 和 g. 作这些变换的目的是使 $\varepsilon_\perp$ 范围扩大并充分利用计算机内存。一般取 $\varepsilon_m=0.5$.

方程 (A.1) 的解可采用 z 的步长为 Δz、y 的步长为 Δy 的方格来近似求得. 其方法是采用修正的克兰克-尼克尔逊有限差分法 (Crank-Nicholson finite difference method)[55], 包括了 (A) 的第二项和第三项. 因此，解下一组线性方程就可从 $f(z)$ 得到 $f(z+\Delta z)$,

$$
\begin{aligned}
\frac{f_{i,j+1}-f_{ij}}{\Delta z}=&\frac{D_1}{2(\Delta y)^2}[f_{i,j+1}+f_{i,j+1}+f_{i+1,j+1}\\
&+f_{i+1,j+1}-2f_{i,j}-2f_{i,j+1}]\\
&+\frac{D_2}{4\Delta y}[f_{i,j+1}-f_{i,j-1}+f_{i+1,j+1}-f_{i+1,j-1}]\\
&+\frac{D_3}{2}[f_{i+1,j}+f_{i,j}]
\end{aligned}
$$

式中 i 系指 y 坐标格而 j 是指 z 格.一般取步进长度 $\Delta y = 0.005$ 和 $\Delta z = 0.0005$ (当 z 小时)或 $\Delta z = 0.02$ (当 z 大时). 如果再减小 Δy 和 Δz, 则可更精确,但消费计算机存贮和计算时间. 发现从完整的方程 (A) 计算出的产额同 Δy 和 Δz 的变化关系不大.

通常,取 $A(\varepsilon_\perp)$ 在 $\varepsilon_\perp = 0$ 的值为零,以及定义 $g(0, z) = 0$, 用准直束的 (5.2-18) 式来计算 $g(\varepsilon_\perp, 0)$, 这样,会使 $z = 0$ 的势最小处的通量为有限值. 在较深的地方,由 f 计算出的通量[见(5.2-37) 式]是由多重散射控制的.

参 考 文 献

[1] J. Stark, *Phys. Z.*, **13**, 973(1912).

[2] J. A. Davies, J. Friesen, and J. D. McIntyre, *Can. J. Chem.*, **38**, 1526(1960).

[3] S. Gorodetzky, A. Pape, E. L. Cooperman, A. Chevallier J. C. Sens, and R. Armbruster, *Nucl. Instr. Meth.*, **70**, 11(1969).

[4] G. Molière, *Z. Naturforsch*, **A2**, 133(1947).

[5] J. Lindhard, K. Dan. Vidensk. Selsk., *Mat.-Fys. Medd.*, **34**, No. 14(1965).

[6] J. H. Barrett, *Phys. Rev.*, **B3**, 1527(1971).

[7] M. T. Robinson and O. S. Oen, *Phys. Rev.*, **162**, 2385(1963).

[8] K. Komaki, Iom Beams Surfaces Layer Analysis, (Eds: O. Meyer, G. Linker and F. Käppeler) Plenum Press, New York, Vol. 2, p. 517(1976).

[9] R. W. Fearick, Ph. D. thesis, University of the Witwatersrand, Johannesburg, (1980).

[10] C. Erginsoy, *Phys. Rev. Lett.*, **15**, 360(1965).

[11] B. R. Appleton, C. Erginsoy, and W. M. Gibson, *Phys. Rev.*, **161**, 330(1967).

[12] D. S. Gemmell, *Rev. Mod. Phys.*, **46**, 129(1974).

[13] 王广厚, 弯曲晶体沟道效应导向高能带电粒子及其应用 (第二届高能实验物理讨论会文集)北京, p. 92—1(1983).

[14] J. A. Davies, J. Denhartog, and J. L. Whitton, *Phys. Rev.*, **165**, 345(1968).

[15] D. V. Morgan, in "Channeling" (ed: D. V. Morgan) J. Wiley, London, p. 79 (1973).

[16] J. A. Ellison, S. T. Chui and W. M. Gibson, *Phys. Rev.*, **B18**, 5963(1978).

[17] B. R. Appleton, J. H. Barrett, T. S. Noggle and C. D. Moak, *Rad. Effects.*, **13**, 171(1972).

[18] T. E. Derry, Ph. D. Thesis, University of the Witwatersrand (1978).

[19] S. T. Picraux, J. A. Davies, L. Erikson, N. G. E. Johansson, and J. W. Mayer, *Phys. Rev.*, **180**, 873(1969).

[20] R. D. Edge, R. W. Fearick, T. E. Derry and J. P. F. Sellschop, *Nucl. Instr. and Meth.*, **194**, 133(1982).

[21]. V. V. Beloshitsky, M. A. Kumakhov and V. A. Muralev. *Rad. Eff.*, **20**, 95 (1973).

[22] J. U. Andersen, O. Andersen, J. A. Davies and E. Uggerhøj, *Rad. Eff.*, **7**, 25(1971).

[23] L. C. Feldman, J. W. Mayer and S. T. Picraux, Material Analysis by Ion Channeling, Accademic Press, New York (1982).

[24] J. U. Andersen and E. Laegsgard, *Rad. Eff.*, **12**, 3(1972).

[25] J. H. Barrett, *Phys. Rev. Lett.*, **31**, 1542(1973).

[26] J. U. Andersen, Dansk, Vid. Selsk., *Mat. Fys. Medd.*, **36**, No. 7(1967).

[27] J. U. Andersen and L. C. Feldman, *Phys. Rev.*, B, **1**, 2063(1970).

[28] I. M. Cheshire, G. Dearneley and J. M. Poate, *Proc. R. Soc.*, **A311**, 47(1969).

[29] 王广厚，沟道粒子的能量损失，南京大学学报，**3**,447(1984).

[30] A. Desalvo and R. Rosa, *J. Phys.*, **C10**, 1595(1977).

[31] M. Luntz and R. H. Bartram, *Phys. Rev.*, **175**, 468(1968).

[32] K. Dettmann and M. T. Robinson, *Phys. Rev.*, **B10**, 1(1974).

[33] H. Esbensen and J. A. Golovchenko, *Nucl. Phys.*, **A298**, 382(1978).

[34] D. Pines, *Phys. Rev.*, **92**, 626(1953).

[35] D. Pines, Elementary Excitations in Solids (W. A. Benjamin), New York (1964).

[36] S. Datz, C. Erginsoy, G. Leibfried and H. O. Lutz, *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **17**, 129(1967).

[37] J. D. Melvin and T. A. Tombrello, *Rad. Eff.*, **26**, 113(1975).

[38] F. Bonsignori and A. Desalvo, *Lett. Nuovo Cim.*, **1**, 589(1969).

[39] D. S. Falk, *Phys. Rev.*, **118**, 105(1960).

[40] D. L. Johnson, *Phys. Rev.*, **B9**, 4475(1974).

[41] K. Dettmann, *Zeit. Phys.*, **A272**, 227(1975).

[42] G. Foti, F. Grasso, R. Quattrocchi and E. Rimini, *Phys. Rev.*, **B3**, 2169(1971).

[43] C. R. Sun, W. M. Gibson, I. J. Kim and G. H. Wang (王广厚), N. K. Bulgakov, N. A. Filatova, A. Forycki, V. M. Golovatyuk, Z. Guzik, R. B. Kadyrov, T. S. Nigmanov, V. D. Riabtsov, A. B. Sadovsky, M. D. Shafranov, L. A. Tyapkin, E. N. Tsyganov, A. S. Vodopianov, J. Wojtkowska and N. I. Zimin, R. A. Carrigan, Jr., T. E. Toohig and M. D. Bavizkhev, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research*, **B2**, 60(1984).

[44] H. E. Schiøtt, E. Bonderup, J. U. Andersen and H. Esbensen, Atomic Collisions in solids, (eds: S. Datz, B. R. Appleton and C. D. Moak), Plenum Press, New York, p. 843(1975).

[45] E. Bonderup, H. Esbensen, J. U. Andersen and H. E. Schiøtt, *Rad. Eff.*, **12**, 261(1972).

[46] K. Bojörkquist, B. Cartling and B. Domeiz, *Rad. Eff.*, **12**, 267(1972).

[47] F. Fujimoto, K. Komaki and H. Nakayama, *Phys. Stat. Sol.*, (a) **6**, 623(1971).

[48] G. Foti, F. Grasso, R. Quattrocchi, I. F. Quercia and E. Rimini, *Lett. Nuovo Cimento*, **4**, 707(1970).

[49] S. U. Campisano, G. Foti, F. Grasso, R. Quattrocchi and E. Rimini, *Phys. Lett.*, **A38**, 433(1970).

[50] N. Matsunami and L. M. Howe, *Rad. Eff.*, **51**, 111(1980).
[51] Y. Quéré, *Rad. Eff.*, **28**, 253(1976).
[52] E. Bøgh, *Can. J. Phys.*, **46**, 653(1967).
[53] A. P. Pathak, *Rad. Eff.*, **61**, 1(1982).
[54] P. Sigmund and K. B. Winterbon, *Nucl. Instr. and Meth.*, **119**, 541(1974).
[55] R. D. Richtmeyer and K. W. Morton, Difference Methods for Initial Value Problems, J. Wiley, New York (1967).
[56] S. U. Campisano, G. Foti, F. Grasso, M. LoSavio and E. Rimini, *Rad. Eff.*, **18**, 157(1972).

第六章 沟道效应和阻塞效应的应用

沟道效应自实验证实后，很快应用于核物理和固体物理的研究. 确定原子核寿命是一项很有意义的工作，它是利用沟道效应的倒易过程——阻塞效应进行的. 沟道效应在固态物理上的应用可大体分为三个方面：晶格中杂质原子定位、表面和界面研究以及缺陷分析，这些应用已成为材料鉴定学的一个重要方法. 近年来，高能沟道效应和阻塞效应在高能实验物理中的应用也很引人注目. 下面我们扼要地叙述沟道效应的实验方法和测量原理，然后再分别举例说明.

§6.1 沟道实验的特点

在入射离子能量为兆电子伏左右的能区，进行沟道实验的装置与背散射技术基本相同（图 3.3-1). 从小型(如静电加速器)出来的轻离子束(如 H^+ 或 $^4He^+$)，能量范围为 0.3—2.5 兆电子伏经过准直后，束流的分散度为 0.1° 或更小，打到靶上的束流直径大约为 1 毫米，晶体样品装在靶室内二维或三维定角器上. 定角器可作倾角 θ 运动，又可作子午角 φ 转动，图 6.1-1 就是专门为沟道实验设计的二维定角器. 另外还要选择合适的固态探测器（如国产 GM101 金硅面垒探测器). 在背散射测量时，探测器的位置通常放在 150°，如果要增加深度分辨率，可以把束转到掠角的位置，也可把探测器放在掠角位置而束流方向不变. 还可以在束流入射的路径上放着环形探测器，这样既可以增加探测器立体角，又比较容易得到双取向的几何安排. 此外，在进行表面研究时，需要超高真空室(图 3.3-10). 而 γ 射线探测器和 X 射线探测器还同时可作核反应分析和 PIXE 等实验用. 图 6.1-2 给出沟道背散射实验的



图 6.1-1　沟道实验测量用的二维定角器照片图

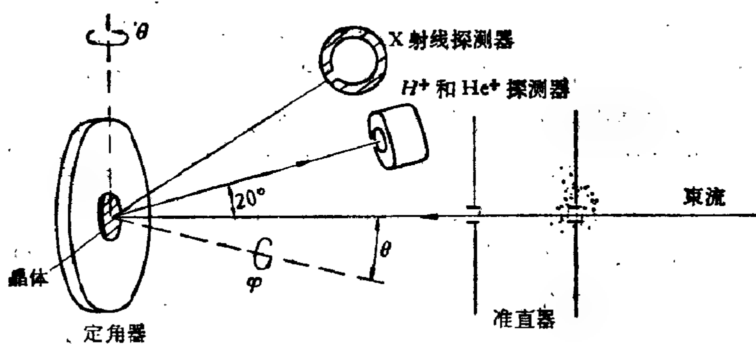


图 6.1-2　沟道实验装置的几何安排

几何安排示意图.

一　晶体定位——定向谱和随机谱

沟道效应本身就提供了一个简单的方法来确定晶体轴或平面

相对于束流的方位．这种定位步骤常常是进行各种沟道实验的第一步．

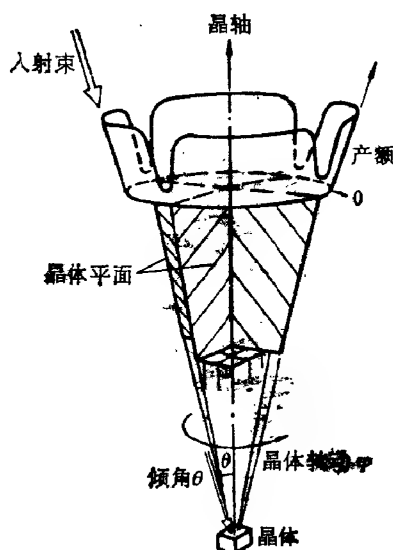
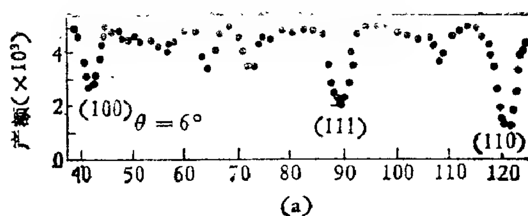


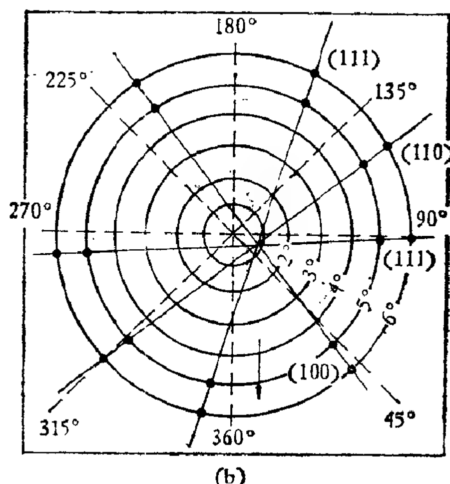
图 6.1-3　兆电子伏 He^+ 背散射产额同晶体转动角 φ 的关系，晶轴同入射束的倾角为 θ

我们在上章图 5.1-1 中示出了晶格原子排列呈现方向性．晶体相对于入射束流的定位，就是根据背散射粒子在束流对准晶体主轴或主平面方向有极小值的原理．定位方法之一就是将晶体相对于束流方向倾斜．在图 6.1-3 中，束流入射到晶体上，其轴与束流方向偏 θ 角．随着晶体绕其轴转动，当转动角位置到达晶格平面同束流平行时，背散射产额出现极小．如果晶体有两个平面（如图 6.1-3），那么转动 360° 时就会出现四个平面极小值．在极坐标图纸上画出最小产额的角位置，又在最小值之间连线的交叉处找出倾角 θ 和转动角 φ，就可找到束流相对于晶轴的方位．

现在来描述怎样找准单晶硅的方位，其〈110〉轴接近垂直于晶体样品的表面．晶体装在定角器上（如图 6.1-2），定角器的轴同入射束的方向倾斜 6°． 然后转动样品并记录背散射产额．图 6.1-4(a) 绘出产额随转动角变化的图（这里只绘出一部分）． 几个很突出的极小位置是 40°、90° 和 120° 附近，绘于图 6.1-4(b) 的极坐标图纸中．围绕〈110〉轴有八个极小位置．再将倾角变成 5° 后转动 φ，又得到八个极小位置．把极小值的线连起来相应于 (100)，(110) 和两个 (111) 晶面．这些线的交叉点对应于〈110〉轴方向．交叉点的坐标就给出定角器的位置，于是就可以调节使束流对准晶体的〈110〉轴向了．图 6.1-4 中所得到的是 $\theta = 0.9°$ 和 $\varphi = 60°$．



(a)



(b)

图 6.1-4 利用沟道方法定位晶体相对于 2 兆电子伏 He^+ 离子束流的方向示意图.(a) 倾角 θ 为 6° 时从晶体表面散射产额与转动角 φ 的关系.(b) 倾角为 5° 或 6° 时在极坐标图上晶体平面极小值位置，图中实的直线相应于样品的晶体平面. 交点为〈110〉轴的位置

在这种极坐标纸上绕每个晶轴的平面方位和数目由晶轴确定的. 图 6.1-5 示出立方晶格中绕三个主轴的主平面. 在金刚石晶体中晶格原子平面产额极小最显著的是 (110). 表 6.1-1 列出了立方晶体中平面和轴向极小值位置，次序是按产额由强变弱. 立体投影图和角度表则是由文献 [1] 得到的.

我们采用习惯的说法，把入射束对准一定的晶格轴或平面得到的背散谱，称为定向谱. 而把非晶格轴或平面方向得到的背散射谱叫随机谱. 取随机谱必须特别小心把晶轴旋转，使得入射束不会同晶体的任何平面或轴相平行. 图 6.1-6 是 1 兆电子伏 $^4He^+$ 离子入射到硅上的背散射谱[3]. 当入射束平行于 Si〈111〉 轴时背

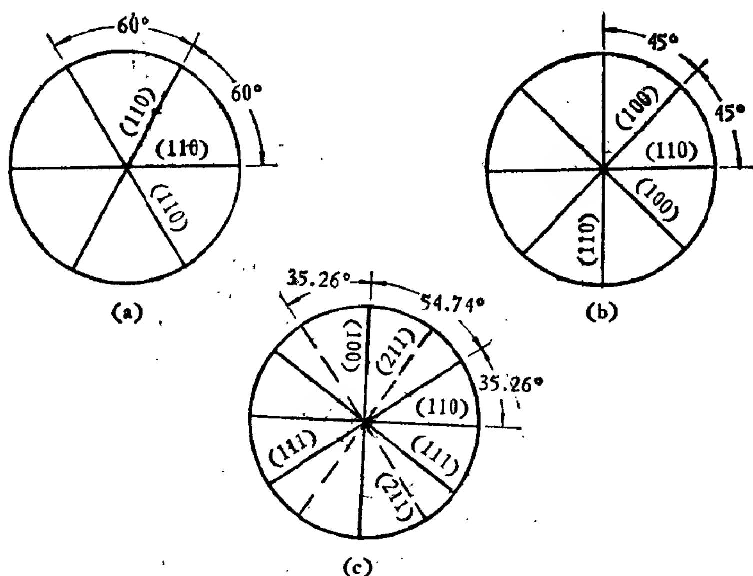


图 6.1-5 立方晶体中围绕三个低指数主轴的主平面方向：(a)〈111〉；(b)〈100〉和 (c)〈110〉. 在体心立方晶体（BCC）中绕〈110〉轴的（211）面的极小值会呈现出来[1]

散射产额大大减弱. 对于沟道粒子要得到背散射能谱和相应深度之间的关系，必须知道离子在沟道条件下的能量损失，这些我们在 § 5.3 已经讨论过了. 图 6.1-6(b) 示出硅中两个不同深度下对晶体方位扫描，方法是在图 6.1-6(a) 中取两个很窄的能量区间 1 和 2，其对应于两个不同的深度 0.1 微米和 0.6 微米，再把束流方向相对于〈111〉轴倾斜，记录下产额得到的.

表 6.1-1 立方晶体结构的平面和轴指数*)

	金刚石	FCC	BCC		金刚石	FCC	BCC
平面 {hkl}**)	110	111	110	轴〈uvw〉	110	110	111
	111	100	100		111	100	100
	100	110	112		100	111	110

*) 表中所列数值的次序是按照文献[2]的阻塞图的数据.
**) uvw 对应于晶体轴和平面的密勒指数（Miller).

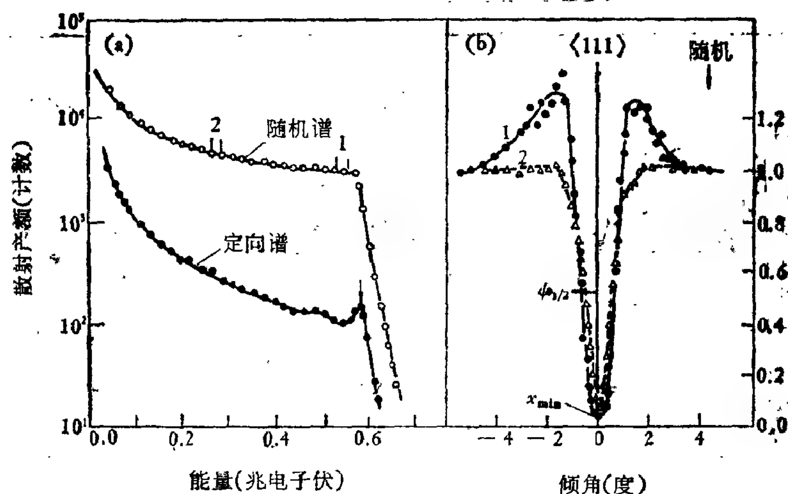


图 6.1-6 (a)1 兆电子伏 $^4He^+$ 离子沿 Si〈111〉轴入射和非沟道方向入射得到的背散射谱. (b) 分别从 (a) 所示的能量区域 1 和 2 (即相应于深度为 0.1 微米和 0.6 微米的归一化产额同倾角的关系

图 6.1-6(b) 还示出实验观察到的临界角 $\psi_{\frac{1}{2}}$ [见 (5.1-16) 式定义]. 最小产额 χ_{min} 定义为入射束同晶轴方向完全平行的背散射产额与随机方向的背散射产额之比. 因此, 它是束流非沟道部分的直接度量. 从图 6.1-6 可以看出,既使在深度 0.6 微米的情况下, 束流中仍有 90% 以上的粒子仍在沟道中. 当角度略大于 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 时产额有很大的增加(即所谓"肩膀", 见第 §5.1 的图 5.1-3). 这种"肩膀"随着深度的增加而很快减弱, 到 0.6 微米时就完全消失了[图 6.1-6 (b)].

定向背散射谱的高能端有一个小峰——表面峰, 如图 6.1-6 (a) 中的箭头所示. 它的面积是表面氧化层中无序硅多少的度量. 在图 6.1-6 所示的情形中含有 6×10^{15}Si 原子/厘米^2,相当于 ~20 埃的氧化硅层. 这比探测器的分辨率 (~300 埃)要窄得多. 因此,表面峰的高度不会有随机产额那么高. 应该指出,就是在表面没有无序硅的情况下,仍然可以观察到相当于 $\sim3\times10^{15}$ 硅原子/厘米^{2}的表面峰, 因为每个原子列的第一个原子不受任何荫蔽, 呈现正常的背散射产额. 这个峰的面积是研究表面弛豫的基础.

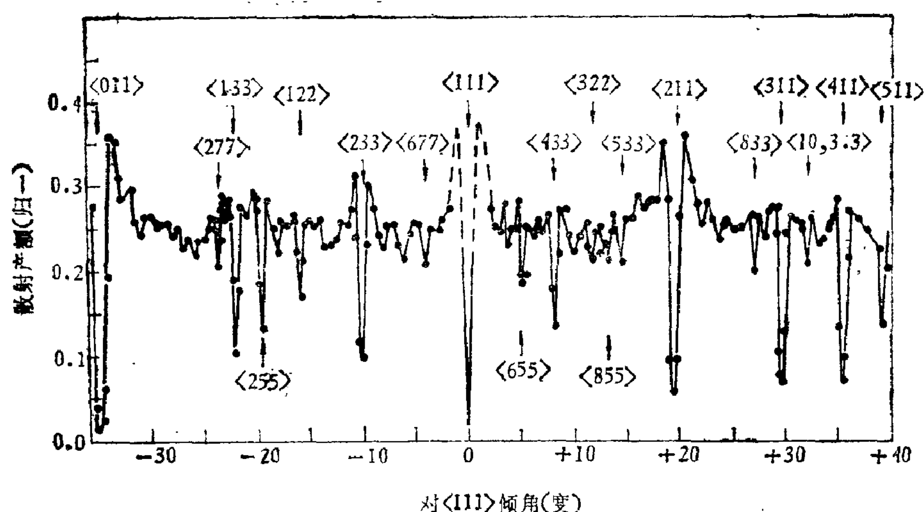


图 6.1-7 1.0 兆电子伏 He 离子在 Si(110) 面沟道效应呈现大量高密勒指数的沟道

平面沟道类似于轴沟道但比相应的轴沟道方向要弱的多.

图 6.1-7 示出一个立方晶体在准直束作用下所具有的沟道效应. 由于大量的高密勒指数方向存在，使得散射产额随倾角的变化呈现非常复杂的情况，如图中〈833〉轴沟道坑是很浅的，但使我们在测量随机产额时发生困难；从而也限制了沟道效应的某些应用. 一般在实验时，把入射束同晶轴方向的夹角放到大约是 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 的 10 倍左右来测量背散射产额就作为这个轴向的随机产额.

二 阻塞效应

沟道效应是外来带电粒子进入晶格受到晶格原子列（或原子平面）导向发生的. 阻塞效应则发生在产生于晶格位置的带电粒子，例如，晶格原子因放射性衰变(或核反应)而发射的粒子，或者入射粒子同晶格原子核发生弹性碰撞而产生的粒子. 如果粒子轨迹起源于晶格原子列的某一个位置，那么，它不可能在小于表征该原子列特性的临界角内跑出晶体，这就是说，它不可能是沟道的，因为它产生于沟道轨迹的禁止区域（如图 5.1-2 所示）. 所以，在

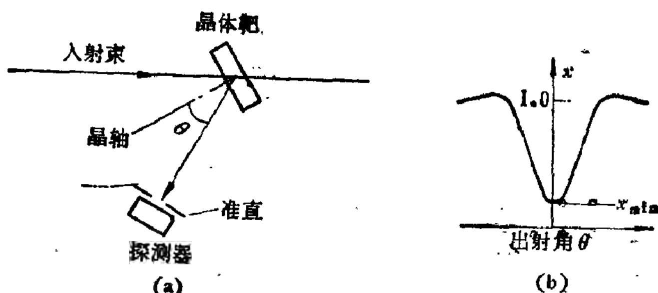


图 6.1-8 (a) 进行阻塞实验的几何安排. 入射束以随机方向入射到单晶靶上，而以准直探测器记录核反应发射的粒子或从宽角卢瑟福散射的粒子. (b) 出射粒子角分布

轴方向上观察发射粒子的产额会大大减少，这就是阻塞效应.

图 6.1-8(a) 是进行阻塞实验的几何安排，与图 6.1-2 的沟道实验类似，但是入射束是在随机方向入射到单晶上. 探测器都要很好地准直，以测量与晶轴方向成角度 ϕ 的出射粒子. 阻塞测量就是确定出射粒子产额同 ϕ 的关系（一般是把测探器绕 $\phi=0$ 为中心移动）. 因此，在阻塞测量中，入射束的作用就是从晶格产生出射粒子，入射束不需要准直得很好，也不一定是带电粒子. 只有在进行核寿命测量时(见 § 6.5)，需要限定入射束引起核反应形成复

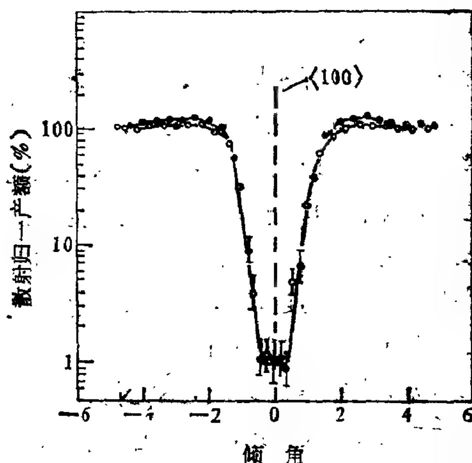


图 6.1-9 1 兆电子伏质子在钨中背散射产额，测量的深度是在表面下 0.3—0.4 微米: ● 沟道结果 ○ 阻塞结果[5]

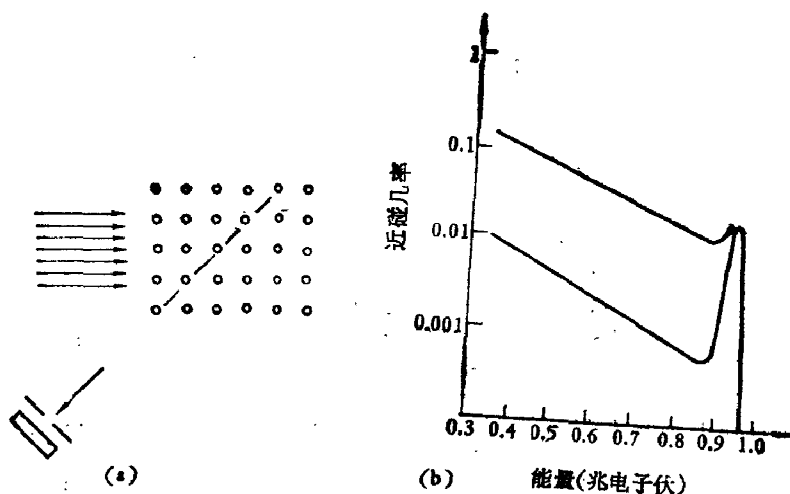


图 6.1-10 (a)同时利用沟道效应和阻塞效应的双定向实验示意图. 入射粒子沿沟道方向进入,出射粒子沿阻塞方向探测. (b)1.0兆电子伏 He 离子入射到钨晶上单定向和双定向的近碰几率

合核的反冲方向，才应对入射束进行准直. 当准直探测器放在主晶轴的方向(即 $\phi=0$)，探测到出射粒子产额最小；随着 θ 增加，产额也增加，这就形成了一个阻塞坑，如图 6.1-8(b) 所示. 它类似于 6.1-6(b) 的沟道坑.

根据倒易原理，不仅阻塞坑和沟道坑类似，而且在理想实验条件(如粒子、能量、晶体方位等相同)下，两个过程是完全等效的. 在沟道坑的测量中，是确定准直很好的入射束打到晶体中原子核的几率. 这个几率是由入射束相对于晶体轴不同取向测得的. 类似，阻塞测量是确定晶体中原子核发射粒子打到准直探测器上的几率. 这个几率是由探测器相对于晶体轴不同取向得到的. 因此，如果不考虑能量损失过程，沟道轨迹和阻塞轨迹彼此成时间反演. 根据统计力学处理[4]，这种正过程和逆过程的几率应相同. 图 6.1-9 实验证明沟道效应和阻塞效应之间遵从倒易原理[5].

在双定向几何安排中，入射束沿着沟道方向入射，出射粒子沿着阻塞方向探测，如图 6.1-10 所示. 由于入射束对准沟道方向，近碰几率减弱了 χ_{min}，又因探测器准直在阻塞方向，所观察到的

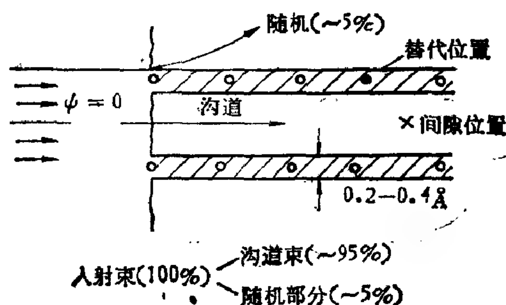
近碰几率又减弱了 χ_{min}，两者合起来总的衰减因子为 χ^2_{min} 量级．这样对出射粒子探测灵敏度减到最小，而对间隙性原子或晶体缺陷的灵敏度达到最大．因此，它对研究晶体中杂质原子和缺陷是很有利的．

§6.2　晶格中杂质原子定位

沟道效应最直接的应用之一就是确定杂质原子在晶格中的位置(替代的或不替代的).当杂质浓度小($\lesssim$1%)时,杂质原子的存在不会影响主晶格的沟道性质．因此，一个替代杂质对沟道粒子的近碰几率同角度关系与主晶格一样，间隙原子散射产生的近碰几率与替代原子完全不同(如图 5.2-8 所示)．

一　基本原理

由上一章的讨论中我们已经知道，沟道效应最重要的内容就



	束流同原子相互作用部分数	
	●	×
定向情况	~5%	100%
随机情况	100%	100%

图 6.2-1　完全准直的束流通过晶体表面时分成沟道和随机两部分

是沟道粒子被导向而不易接近原子列或原子平面附近 0.1 Å 的区域. 如果把晶体分为允许区域和禁止区域(图 6.2-1), 则对于沟道粒子,碰撞参数小于 0.1 Å 的所有物理过程都是禁止的.

散射产额在沟道情况下大量减弱不仅是离子同晶格原子列发生软碰的结果,而且也是同替代原子(如图 6.2-1 中的 ● 位置)发生软撞的结果. 但是, 对杂质原子处在沟道的×位置(允许区域)就可以同束流的沟道和随机部分都发生作用,因此产额不会衰减. 相反,由于通量峰效应,这类间隙原子的散射产额还会有一定程度的增加(如图 5.2-8). 晶格中屏蔽和未屏蔽杂质原子对散射产额的显著差别为沟道效应确定原子位置奠定了基础. 只要同时测得杂质原子散射的角产额曲线和主晶格原子的角产额曲线并以后者为参考加以比较,即可分析杂质原子在晶格中的位置.

二　晶格对称性和杂质原子位置

我们已经指出, 晶格中杂质位置的分析就是在轴向或平面方向进行角扫描时比较杂质原子的散射产额和晶格原子的散射产

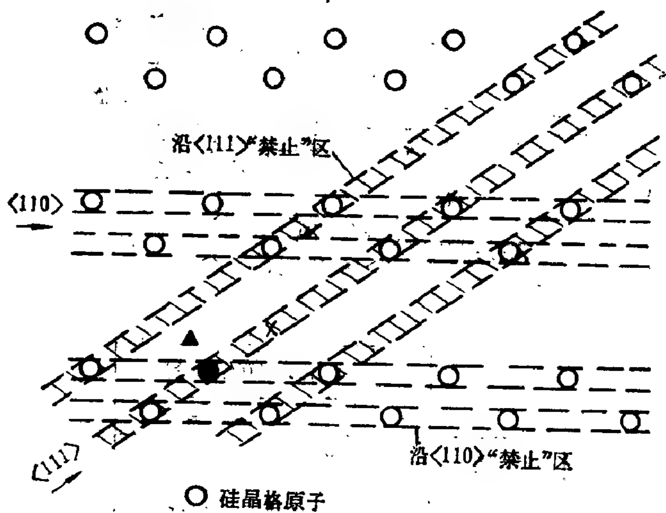


图 6.2-2　Si 晶 (110) 面呈现两个沟道方向: 〈110〉和〈111〉. 黑点●表示替代位置, ×表示四面体位置, ▲表示另一个非替代位置

额．如果杂质原子对沟道粒子的散射产额很小，甚至分辨不出，说明杂质原子是在晶格原子列上，或原子平面上(至少在晶格原子均方振幅之内)而被晶格原子所掩蔽，如图 6.2-1 中的黑点 ● 位置．但是，连续进行不同方向的沟道测量可以确定在晶格中的位置．

图 6.2-2 给出简化二维晶格示意图，可以看出怎样使用沟道效应来确定杂质在硅晶格中的位置． 三个杂质的位置分别是：● 是替代原子位置；× 是四面体间隙位置；▲是另一个非替代的位置．替代杂质的沟道行为在〈110〉和〈111〉方向上同晶格原子对沟道粒子的行为一样；四面体位置上杂质(×)的沟道行为同替代杂质(●)在〈111〉方向上是相同的，但是，根据沟道中的通量分布特点，在〈110〉方向上使产额增强(如图 5.2-8 所示)．另一个非替代杂质(▲)位置在〈110〉方向同四面体上的间隙杂质 × 差不多，同时在〈111〉方向上增大散射产额．因此，通过观察晶体二个或更多方向上产额随角度的变化，即可确定杂质原子的精确位置．第三章中我们已经讨论过各种方法：如背散射、离子感生 X 射线发射和核反应方法，均可用来监测杂质原子，常常为了得到晶体中杂质原子的可靠信息而把这些方法结合起来，相互补充．最常见的是沟道和背散射技术结合起来分析辐射损伤和缺陷．

三 "完全"替代的杂质原子

图 6.2-3 示出 1.2 兆电子伏 ^{4}He 离子自铜和金上(铜单晶内含有浓度约为 2% 的金)背散射的归一化谱随角度的关系，这种合金是一种典型替代型固溶体，在所有轴向和平面方向上，杂质原子对散射产额的影响均与主晶格原子在大小和角宽度上完全相同，主晶格铜原子和杂质的金原子均受到相同的屏蔽(如图 6.2-2 中的黑点 ● 位置)．实验证实两者背散射产额相同，由晶格的对称性要求大多数散射中心完全处在晶体中所有相等轴的交叉处，如铜晶格中 6 个〈110〉轴的交叉处．当然，我们不能说，所有的原子都放得那么好，但是，观察到铜中金原子散射产额减小了 ~94%，表明至少有 ~94% 的金原子是排列在〈110〉原子列上． 假定有类似

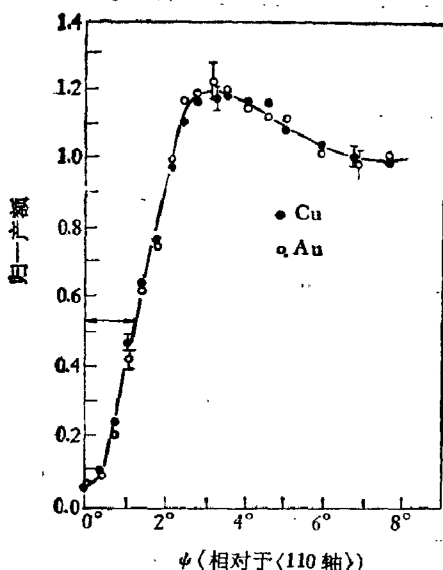


图 6.2-3 1.2 兆电子伏 ⁴He 离子入射到 Cu〈110〉上的沟道归一产额，Cu 中含有 2% 的 Au，黑圆点（●）表示铜的散射，圆圈（○）表示 Au 的散射[6]

的比例排列在其它五组〈110〉的原子列上. 由于在铜的面立方晶格中，两个或更多原子列仅可以在替代位置交叉. 由此可以推出，对任何一组〈110〉轴的原子列来说，在 ~6% 的杂质原子中有不到五分之一是处在非替代位置. 因此，至少有 93% 的杂质原子是在替代位置.

严格的说，图 6.2-3 中铜和金的角产额曲线分不开，两种原子在〈110〉方向上屏蔽的程度相同. 这要求所有的金原子处在替代位置的 0.1 Å（均方振动振幅）内. 实际上，这种完全屏蔽的情况很少观察到. 通常，杂质原子的最小归一产额要比本体原子大，有些杂质原子不完全在替代位置（如硅中含铋的情形）.

四 "不完全"替代的情况

图 6.2-4 是 1 兆电子伏 ⁴He 离子入射在硅中含铋的样品〈110〉和〈111〉轴沟道产额的角分布, 靶的温度是 300K, 用 150 千电子

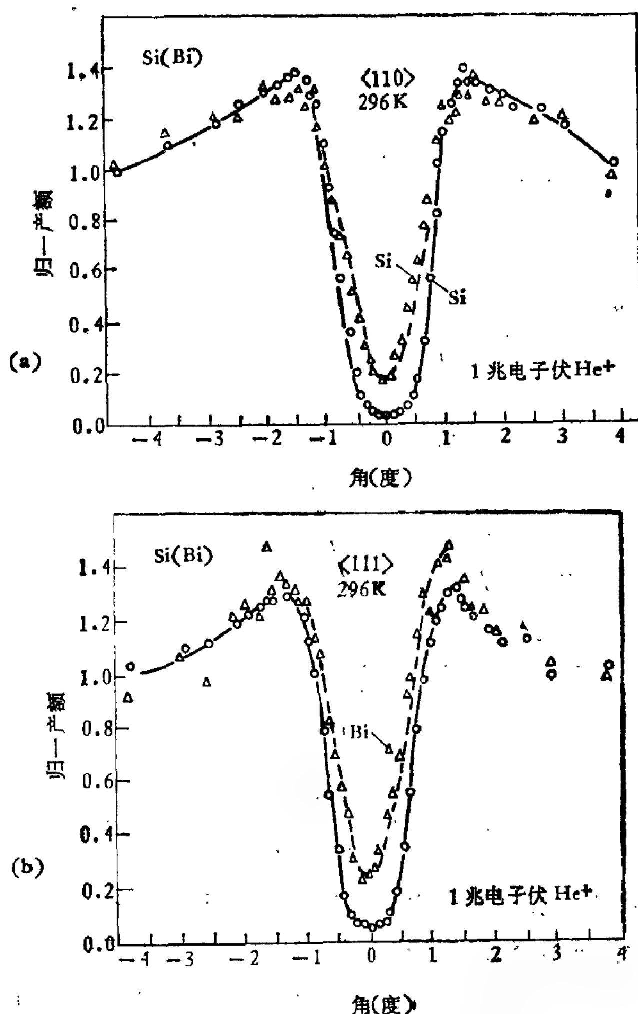


图 6.2-4 1 兆电子伏 $^4He^+$ 离子自 Bi（三角形标记）和 Si（圆圈标记）散射的沟道角分布．（Bi 注入 Si 样品）：（a）〈110〉方向（b）〈111〉方向[7]

伏 Bi 在室温下注入 Si，然后在 900K 退火半小时，注入剂量为 1.8×10^{14} 铋原子/厘米^2，同一样品上测量〈110〉和〈111〉两个方向的角分布．可以看到在"肩膀"区域，Si 和 Bi 的散射产额类似，但当角度变小时 Bi 的沟道坑比 Si 的沟道坑要窄，其对应的最小

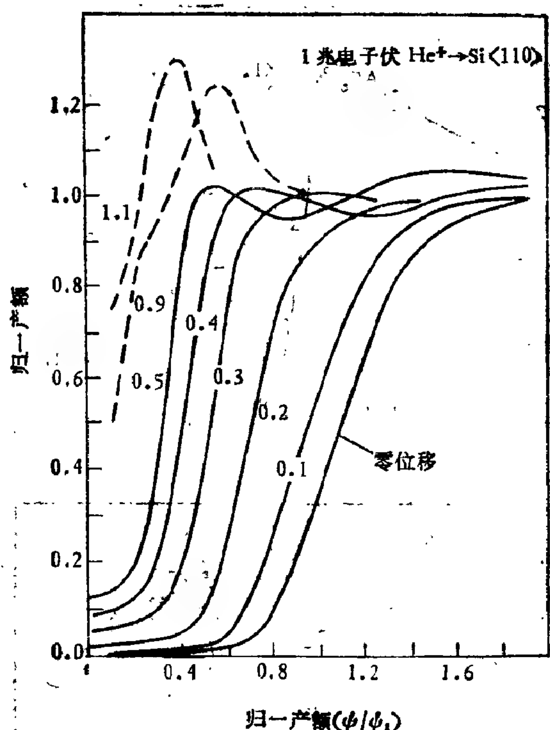


图 6.2-5 计算产额角分布与离开原子列平衡位置的距离的关系（以Å为单位），这是 1 兆电子伏 ^4He 离子在 296K 时沿 Si⟨110⟩ 轴入射的结果[7]

产额值也较大．为了解释这个实验结果，根据林哈德连续势模型，在 § 5.2 讨论通量峰效应的基础上，计算了 1 兆电子伏 $^4He^+$ 离子沿 Si ⟨110⟩ 轴沟道产额角分布同原子离原子列平衡位置的位移的关系，如图 6.2-5 所示．沟道坑的角宽度随着位移的增加而迅速减小．而最小产额却随之增加了．培克罗克斯（Picraux）等人[7]曾假定有一半 Bi 原子离 Si 晶格位置的位移是 0.45 Å，而另一半完全处于 Si 晶格的替代位置，来拟合整个沟道坑，得到的曲线与实验结果比较符合．他们还发现计算的角产额分布对杂质原子离替代位置的位移大小灵敏，但对其方向不灵敏．图 6.2-6 给出了理论计算与实验结果的比较，可清楚看出，铋和硅的最小产额 χ_{min}

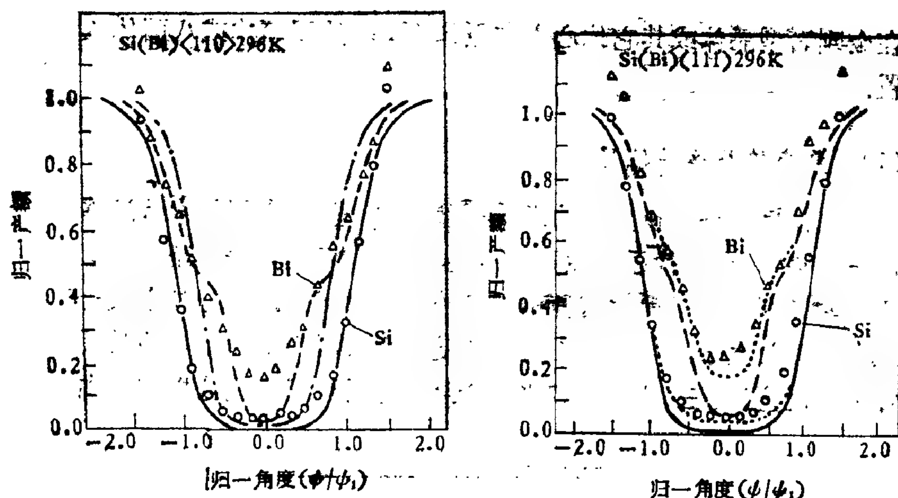


图 6.2-6 图 6.2-4 所示的产额角分布理论计算值与实验测量结果比较，左边是 ⟨110⟩ 轴，右边是 ⟨111⟩ 轴．实线是硅晶格计算的结果．链式（—·—）表示铋原子沿 ⟨110⟩ 方向位移了 0.2Å，虚线（---）表示在 ⟨110⟩ 方向有 50% 的铋原子处在晶格位移，50% 的铋原子位移了 0.45Å[1]

均比理论计算的值要高．对于铋，归一化最小产额达 0.15，表明可能有 15％ 的铋原子在晶格中是随机分布的．

五　间隙原子

精密确定间隙原子位置通常需要知道沟道中间区域通量分布的可靠信息，这在上一章的 §5.2 已作了详细讨论．实验上确定“非替代”杂质原子在复杂分布中的位置需要对主晶轴和平面进行扫描．实验结果的解释需要进行计算机模拟已得到通量分布．在沟道粒子和具有一定分布的杂质之间的反应产额可由

$$\chi(E_0, \psi_{in}, z) = \int_E \int_r F(E, r, z)\sigma(E, z)dEdz$$

给出．它类似于 (5.2-47) 式．这里 $\sigma(E, z)$ 表示反应截面，E_0 是入射粒子的能量．积分范围是有效能量范围和单位晶胞的面积．

然而，杂质原子往往处在某些主晶轴或主平面的间隙位置，如

在金刚石型晶体或其它体心立方晶体（bcc）的四面体或八面体位置.

(1) 氢在钨晶格的位置

氢在材料科学技术中的最重要参数之一是其在固体中的迁移性质. 实际上，这种迁移性质常常受氢-缺陷相互作用控制，而氢位置测量则可直接提供这种相互作用的结构特征. 缺陷和杂质相互作用以及电子能量的修正使得即便在完整晶体情形下也很难预知氢的位置. 第三章的 § 3.7 和文献[8]已经讨论了一些分析非晶态

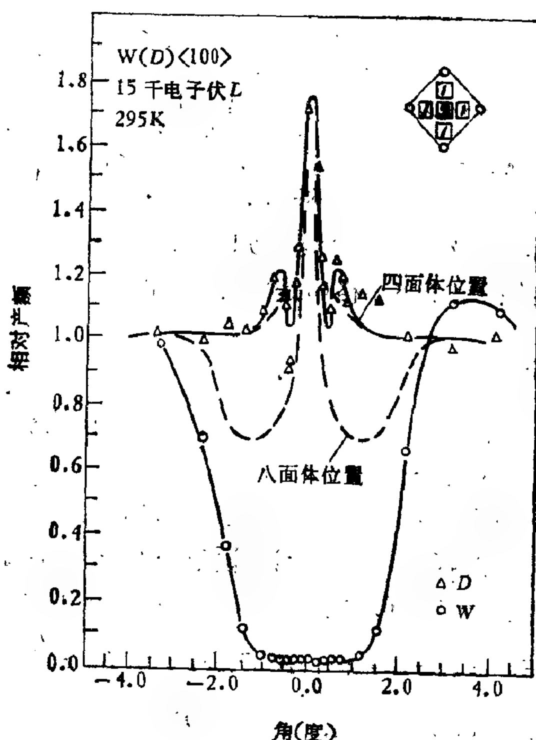


图 6.2-7 近碰几率同入射角的关系，750 千电子伏^{3}He 自 W<100> 沟道方向背散射产额(○)和经 D(^{3}He, P)^{4}He 反应的质子归一产额(▲). 样品是 15 千电子伏 D 在 295 K 下注入钨晶[4]. 预计D在 W 晶格位置示于图 6.2-8

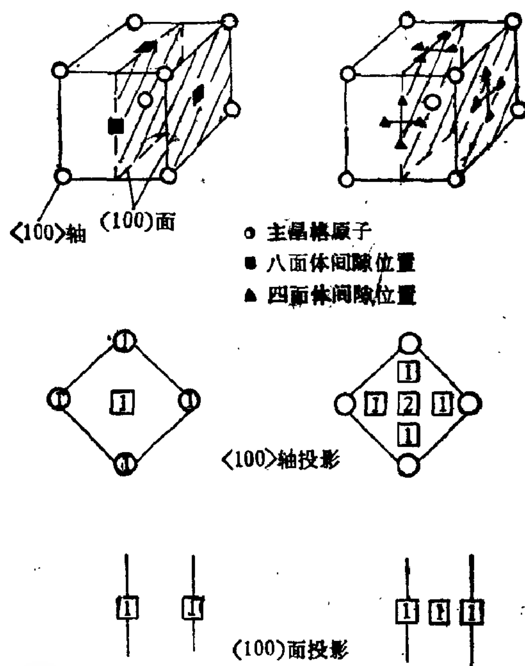


图 6.2-8 在体心立方晶格中八面体(a)和四面体(b)位置的等效位置和投影位置

(如超导体)中氢的核反应分析法.

现在我们来看一看氢在晶格中的行为. 把氢的同位素氘注入到钨晶深度 ~1000 Å, 局部浓度约 0.1% 的量级. 氘很容易通过核反应 $D(^3He, P)^4He$ 探测到. 因此, 同氘的近碰事件就是核反应,而 ^3He 背散射事件则是同 W 的主晶格近碰. 入射粒子束对主晶格 W 的角扫描给出与沟道过程相关的沟道坑, 如图 6.2-7. 而对氘的扫描则与前面替代型情况完全不同,表明 W 中的氘是处在间隙位置. 根据图 6.2-2 所示 的方法来探测氘处在钨的体心立方晶格(bcc)中最可几的间隙位置. 图 6.2-8 给出体心立方晶格的四面体和八面体及其相应〈100〉轴和(100)面的沟道投影. 间隙位置用方块表示, 发生事件的相对几率用方块数目表示. 两个间隙位置在(100)面沟道方向是不同的, 所有等效的八面体位置均

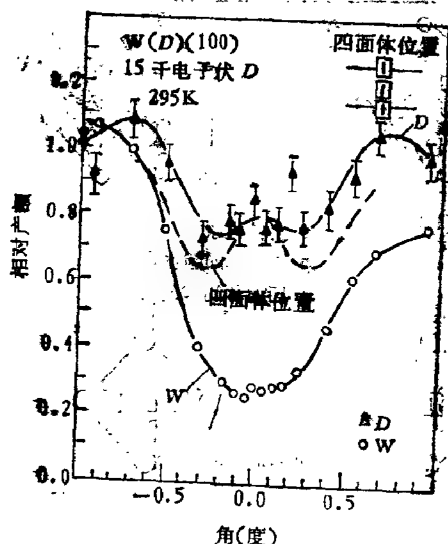


图 6.2-9 D^+注入 W 样品中平面沟道(100)的角扫描. 虚线表示计算得到的四面体位置的角产额,八面体位置的角产额同主晶格相同[9]

在(100)面上,而四面体位置有三分之二的原子是在晶格平面上,有三分之一的原子是在晶格平面之间. 因此,对于占据八面体位置的情况下,氘的信号同 W 晶格具有相同的沟道坑,而对于四面体位置的情况下,氘的沟道坑近似是钨坑的三分之二,并且在 $\phi=0$ 处有一个小峰叠加在上面.

图 6.2-9 为(100)面沟道方向扫描的角分布,显然同八面体位置不符合,而同四面体位置的计算结果比较符合,表明氘注入后主要是在四面体位置,或者靠近四面体位置. 这在轴向投影中也是很明显的,八面体位置预示有 $\frac{1}{3}$ 的沟道坑,四面体位置则没有任何屏蔽. 轴向的角扫描(图 6.2-7)不出现坑,但却在中心峰附近显示一些小的精细结构,这是同四面体位置相符合的.

(2) TiO_x 系统中的原子位置

现在讨论不同组分构成晶格中的原子位置,即 TiO_x 系统对其

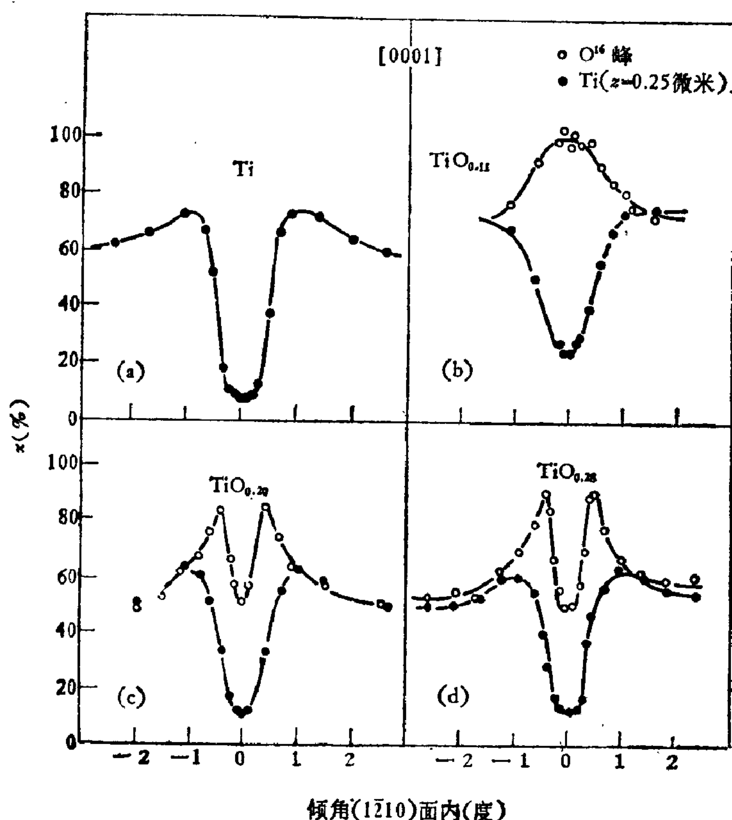


图 6.2-10 不同 TiO_x 组分时〈0001〉轴沟道的归一产额，倾角是在$(1\bar{2}10)$平面内，这个晶格原子平面内含有 Ti 原子和 O 原子；圆圈 O 是核反应的质子产额，黑点●是来自 Ti 原子的背散射产额．(a) $x=0$, (b) $x=0.11$, (c) $x=0.20$, (d) $x=0.28$[10]

中氧原子浓度从 0.11 到 0.39．产额的角分布呈现与杂质浓度的关联特性，因为杂质浓度高影响到沟道中的通量分布．对于 Ti 晶格的〈0001〉方向，氧原子是在 Ti 原子列构成的沟道中心．这里仅讨论在 (1210) 面内扫描沿〈0001〉轴的沟道角分布，(1210) 面是一个含有氧和钛原子的混合平面．

图 6.2-10 给出不同组分下产额的角分布．用 1 兆电子伏 D^+ 束可以同时用宽角卢瑟福散射观察 Ti 原子的沟道行为和用 $^{16}O(d,P)^{17}O$ 反应观察氧的沟道行为．在低浓度时，氧的子晶格不会

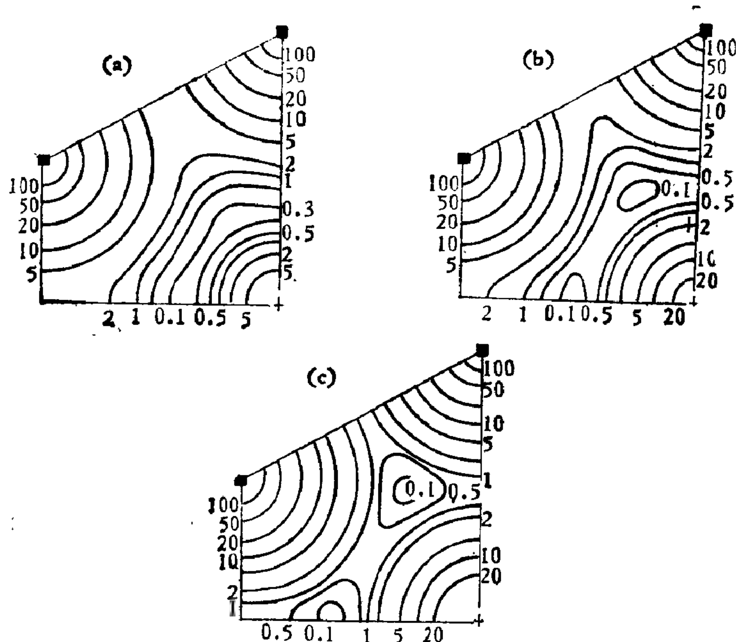


图 6.2-11　根据林哈德标准势计算出沿 Ti（■位置）〈0001〉轴向氘的等势图．氧原子在沟道中心（＋号位置）组分不同：(a) $x=0.1$，(b) $x=0.25$，(c) $x=0.5$．在晶格原子列处的势值为 ～115 电子伏

引起沟道效应，存在一个很弱的通量峰，这是由于 Ti 和 O 原子列对入射粒子的平衡排斥效应[10]．在浓度高时，O 原子列很强，足以在核反应中呈现一个产额坑，坑的角宽度取决于 Ti 和 O 原子列

表 6.2-1　间隙位置的原子列和原子平面势 U_{int} 及平均横能量 $\bar{E}_{\perp 0}$[10]

x	〈0001〉轴		(0001) 面	
	U_{int}	$\bar{E}_{\perp 0}$(电子伏)	U_{int} (电子伏)	$\bar{E}_{\perp 0}$ (电子伏)
0.025	1.0	9.4	…	…
0.05	2.8	9.0	…	…
0.1	6.7	8.5	0.9	5.5
0.25	19.2	8.0	3.5	5.0
0.5	41.2	8.2	8.7	5.1
1	…	…	20.4	6.4

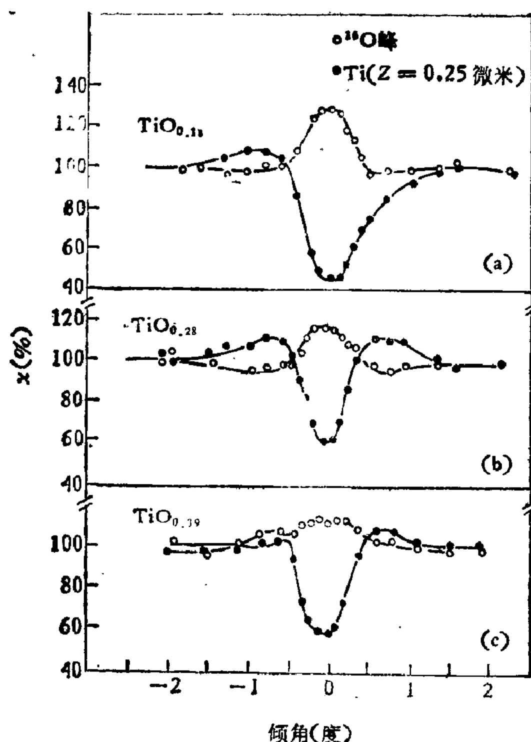


图 6.2-12 不同 TiO_x 组分下 (0001) 面的沟道归一产额. 圆圈○为氧，黑点●为钛: (a) $x=0.11$ (b) $x=0.28$, (c) $x=0.39$[10]

不同强度. 图 6.2-11 绘出不同氧浓度下〈0001〉轴沟道的连续势，它们是根据林哈德标准势(5.1-6)式计算的. 表 6.2-1 列出 TiO_x 系统中不同组分的〈0001〉轴和(0001)面的氧原子列势值 U_{int} 和氘的初横能量的平均值 $\bar{E}_{\perp 0}$，可以看到，只有当 $x>0.1$ 时间隙原子列的势才会高于 $\bar{E}_{\perp 0}$ 值. 因此，只有浓度高于 0.1 时才会看到氧的坑，这与实验结果符合. 图 6.2-12 给出 TiO_x 各种组分下(0001)面的归一产额. (0001)面是由单元素组成的，因此为 Ti 子晶格散射的曲线总会呈现沟道效应，而O子晶格的反应产额给出高于随机产额的峰. 杂质氧可以看成是单个间隙原子. 然而，实验还发现，随着间隙原子浓度的增加，在间隙位置平面沟道的通量峰效应也逐渐消失[如图 6.2-12(c)].

六 内壳层X射线产额的沟道关联

最后，讨论一个内壳层X射线产额同沟道关系来确定杂质原子的位置. 样品是铁单晶在室温下注入钙[11]. 用 1.5 兆电子伏 $^4He^+$ 作分析束轰击晶体〈111〉轴向得到X射线谱如图 6.2-13，其中主晶格元素 Fe 有 K_α 和 K_β 峰，另外两个峰是由放在靶和X射线探测器之间的 Ti 吸收体产生的，用以改善杂质-主晶格元素X射线强度比（见图 3.6-24），注入的 Ca 就显示出来. 图 6.2-14 示出在〈100〉和〈111〉方向角扫描得到类似谱峰面积分析的结果. 虚线是相应于离子注入深度的 ^4He 离子背散射产额. 数据分析得到表面有 55% 的 Ca 是在替代位置. 对注入体和主晶格扫描得到不同的角宽度表明 Ca 原子对正常的替代位置有一定的位移.

杂质进入晶格可以在替代位置也可以在间隙位置. 显然，它们的相对大小和化学束缚性质对其在晶格中位置有重要影响. 然而，杂质原子的位置并不能由一般的固态理论推算出来，因为别的

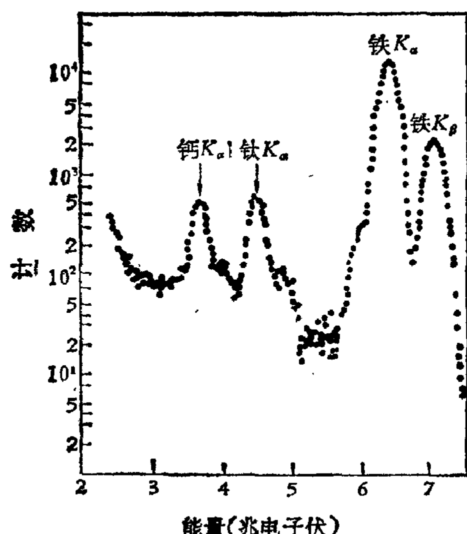


图 6.2-13 1.5 兆电子伏 ^4He 离子入射到 Ca 注入 Fe 单晶〈111〉轴沟道方向得到的X射线谱[11]. Ca 剂量为 3×10^{15}/厘米^2

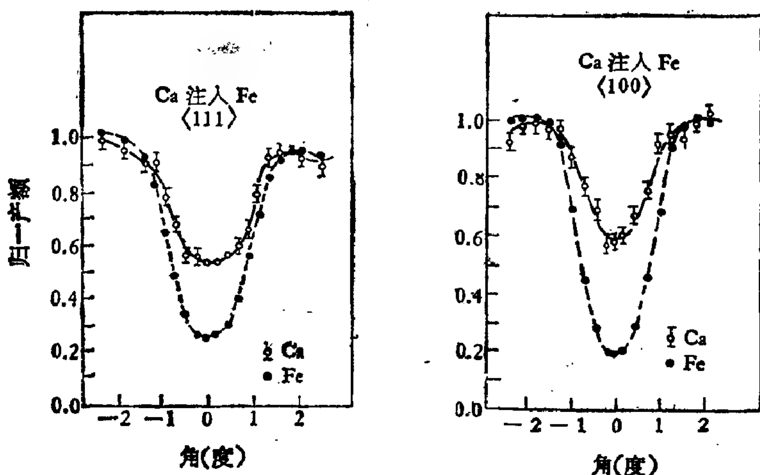


图 6.2-14 在 Ca 注入 Fe 单晶中 ⟨111⟩ 和 ⟨100⟩ 轴角扫描[11]

一些因素，如对称性，杂质同晶格缺陷相互作用以及杂质之间的相互作用(成对性质)都会对杂质的位置起不同程度的影响，在离子注入中，慢化过程的碰撞起着重要作用.

在探测固态结构的许多方法中，中子散射和X射线衍射能够给出主晶格和杂质组合在一起所构成的结构的周期特性，但不能给出杂质本身的位置；而在离子沟道效应的研究中主晶格本身就确定了沟道离子的空间分布，这种分布又受着杂质原子位置的影响和“监视”.因此，在沟道效应中可以确定杂质原子相对于主晶格的位置. 其外，沟道方法对接近表面的特性较为灵敏，这一点我们将在下一节讨论. 当然，利用沟道效应研究晶格中杂质位置也有局限性：(i) 晶体不完整 (或存在较多缺陷)；(ii) 探测灵敏度；(iii) 分析束引起的辐射损伤；(iv) 进行精密计算沟道效应较为困难；(v) 晶体对称性不好时，确定位置含糊. 沟道效应探测杂质原子的灵敏度一般为 10^{-4}，这在许多固态研究中是足够了. 利用轻离子轰击内壳层X射线产生的结果相配合能使探测灵敏度提高(如图 6.2-13 和图 6.2-14). 在进行定量的分析研究中，进行蒙特-卡罗计算机模拟对于建立理论模型也很有价值.

§6.3 缺陷分析

材料的许多性质是受缺陷影响和控制的. 因此，材料的加工要求在不同处理过程(如半导体中掺入杂质的扩散,金属硬化以及离子注入时表面合金的形成）中控制缺陷. 沟道效应测量可用来研究和监督材料加工过程中结构缺陷的引入和除去. 这里重点讨论沟道效应对结构缺陷的灵敏性. 上一章讨论了完整晶体中一旦粒子是沟道的，那么它将维持沟道运动的轨迹；一个不完整晶体包含着缺陷,缺陷可以使沟道粒子散射而变成非沟道运动,这就是退道，如图 6.3-1 所示. 除了完整晶体本身因电子和核引起多重散射（§5.4 中的二、三节）使沟道粒子退道外，缺陷引起的退道使背散射产额增加(§ 5.4 中的六节和 §5.5). 仔细研究退道过程可以得到位移原子的数目和它们的深度分布.

无论是直接背散射还是退道都与缺陷的特性有关. 如果晶体内有一"非晶"结构且位移原子是随机分布的，沟道效应可以精确地确定不规则原子的深度剖析和数目. 如果缺陷不是随机分布，或者缺陷聚集成位错环. 缺陷簇和层状缺陷等，沟道粒子同它们的相互作用以及它们对退道的影响至今还不完全清楚，不过已引起人们相当的重视[12]. 沟道实验仅可提供晶格无序程度的标志，但不能直接给出缺陷的数目和性质.

研究缺陷引起的退道是利用沟道效应判别各种缺陷的主要方法. 第五章的 § 5.4 和 § 5.5 已经从理论上说明了退道与缺陷密度和缺陷状况有一定的联系 [见 (5.4-58) 式和 (5.4-72) 式]. 本节中将根据实际测量分析的需要，讨论不同类型缺陷的退道因子 σ_D. 单位深度的退道几率 $\frac{dP_D}{dz}$ 是由缺陷退道因子(截面) σ_D 和缺陷密度 N_D 的乘积给出:

$$\frac{dP_D}{dz}=\sigma_D N_D(z) \tag{6.3-1}$$

表 6.3-1 给出点缺陷、线缺陷、面缺陷和体缺陷的退道因子的相对

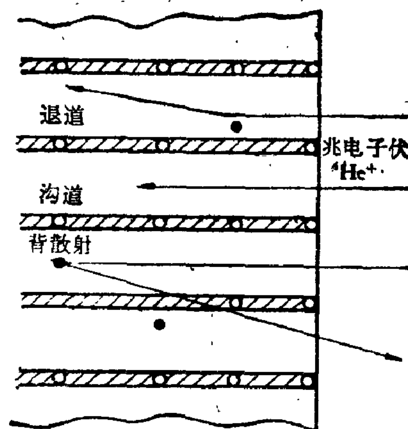


图 6.3-1 沟道粒子在缺陷上直接背散射和退道示意图

表 6.3-1 缺陷退道因子 σ_D 和密度 N_D 的定义*)

缺陷	类别	退道因子 σ_D(单位)	缺陷密度 N_D(单位)
间隙	点	面积(厘米^2)	单位体积中的数目(厘米$^{-3}$)
位错	线	面积/缺陷长度(厘米)	投影长度/单位体积(厘米$^{-3}$)
堆垛层错	面	面积/缺陷面积	投影面积/单位体积(厘米$^{-3}$)
孪生缺陷	体	面积/缺陷体积(厘米$^{-1}$)	缺陷体积/单位体积

*) 单位深度的退道几率 $\frac{dP_D}{dz}=\sigma_D N_D$.

单位. σ_D 和 N_D 的单位依赖于缺陷类型，所以单位深度的退道几率 $\sigma_D N_D$ 的单位是 cm^{-1}. 对于点散射中心，例如间隙原子，σ_D 可以看成是退道截面并且 N_D 可看成是一定深度中单位体积内间隙原子的密度. 如图 6.3-1 所示的点缺陷可以直接把沟道粒子经一次碰撞就散射退道.位错则是扩展性缺陷的例子，它是缺陷周围变形引起的退道，这种线缺陷在垂直于沟道方向的投影尺寸决定着它对退道的贡献.

一 点缺陷

在图 6.3-1 中，均匀束流打到沟道中的孤立原子（位移原子）

上，直接被散射退道．这时散射角大于临界角（$\psi_{\frac{1}{2}} \sim 1°$），碰撞参数比较小（$\sim 10^{-2}$ Å）．因此，为了简化起见，在计算中利用非库仑屏蔽势，把退道看成是完整晶体中孤立位移原子两体散射的结果．

这些条件下沟道中孤立原子的缺陷退道因子是把一个粒子散射到角度 θ 大于临界角 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 的近碰几率的截面．非屏蔽的散射截面(卢瑟福散射)是

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left[\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E \sin^2(\theta_{C.m.}/2)}\right]^2 \tag{6.3-2}$$

这是在质量中心系，见（3.1-10）式，但不包括实验室坐标系中 M_1/M_2 的小修正项．方程（6.3-2）在轴沟道圆柱对称情况下对大于 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 的角度积分得到

$$\sigma_D(\psi_{\frac{1}{2}}) = \int_{\psi_{\frac{1}{2}}}^{\pi} \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \tag{6.3-3}$$

$$= \frac{\pi Z_1^2 Z_2^2 e^4}{E^2 \psi_{\frac{1}{2}}^2} \tag{6.3-3a}$$

式中 $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$ 以及采用小角展开式来表示 $\sin\theta$．在（6.3-3a）式中利用（5.1-12）式近似表示临界角 $\psi_{\frac{1}{2}} \approx \psi_1 = (2Z_1Z_2e^2/Ed)^{1/2}$ 得到

$$\sigma_D \approx \frac{\pi}{2} \frac{Z_1 Z_2 e^2 d}{E} = 2.3 \times 10^{-21} \frac{Z_1 Z_2 d}{E} \text{厘米}^2 \tag{6.3-4}$$

其中 d 是轴向原子间距，单位为埃，入射粒子能量 E 是兆电子伏．若用 2 兆电子伏 He 离子沿 Si⟨100⟩ 轴入射（$d = 5.43$ Å），$\sigma_D = 1.7 \times 10^{-19}$厘米^2．这个截面比晶体沟道（$10^{-15}$ 厘米^2）的面积小多了，因此一个孤立的缺陷原子是不能关闭沟道的；甚至在一个沟道中有几个孤立原子也不会改变大多数沟道粒子的运动特性．

在第五章中我们已经谈到完整处理应该考虑沟道粒子的通量分布和孤立原子在沟道中的位置(§5.4)．然而，在实际晶体中孤立的主晶原子(即自间隙原子)的位置在缺陷浓度高（一般在沟道研

究中需 ≳ 1%）的情形下是不太清楚的．实际上，常常假定沟道中这些原子的分布是随机的．于是，不需要知道沟道粒子通量分布的细节，仅需知道有多少粒子仍处在沟道之中，即沟道分数．因为当沟道中所有原子具有相同占据几率时，一定沟道粒子的退道几率同轨迹无关．因此，在这种位置随机近似中，得到点缺陷退道因子是唯一的．

这种分析是建立在单散射基础上的．只有在束流横穿孤立原子总面密度小于 10^{17}/厘米^{2}时，单散射才成立．例如，缺陷密度 ～10%，单散射近似所能应用的深度约 1000 Å．在沟道粒子横穿缺陷面密度较大时，必须考虑多重散射．

二　晶体覆盖非晶或多晶薄膜

如果晶体表面有一层非晶薄膜（或多晶层），入射束的方向对

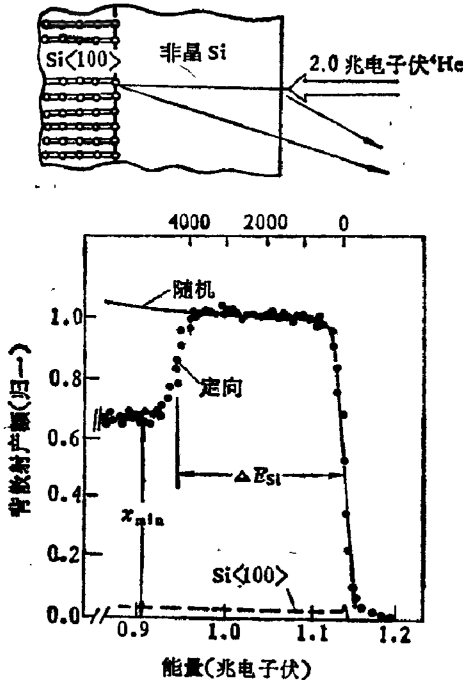


图 6.3-2　2.0 兆电子伏 $^4He^+$ 在非晶薄膜的 Si<100> 方向背散射和沟道谱，以及非晶层下面的退道

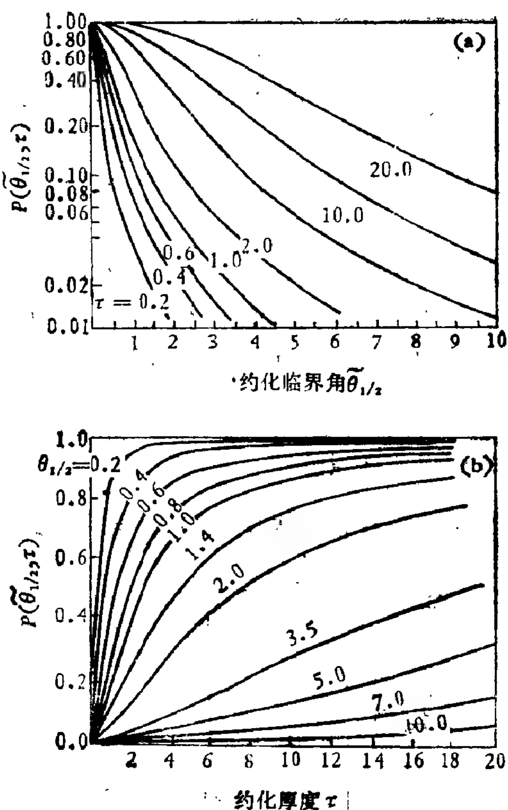


图6.3-3 非沟道粒子分数（a）$\widetilde{\theta}_{\frac{1}{2}}$ 的函数（b）同约化厚度 τ 的关系[15]

准晶体衬底的轴沟道，那么自非晶层的背散射产额同随机谱一致，如图 6.3-2 所示. 在非晶和晶体界面处的定向产额下降的情况下，这时粒子已受晶格沟道影响. 正是这些为一定厚度非晶材料散射到临界角外的粒子数目决定着缺陷退道因子. 从退道的角度看，可把多晶层作非晶处理.

实验上，紧靠非晶层下面的晶体区域的背散射产额 $\chi_{\min}$（图 6.3-2）同非晶层每平方厘米的原子数目联系起来，因为这种产额是散射到沟道临界角外的粒子数确定的. 理论上，在穿过几千埃厚的非晶层时，粒子经受多次小角偏转. 因此，必须考虑多重散射（§ 5.5）. 从多重散射理论得到最小产额由

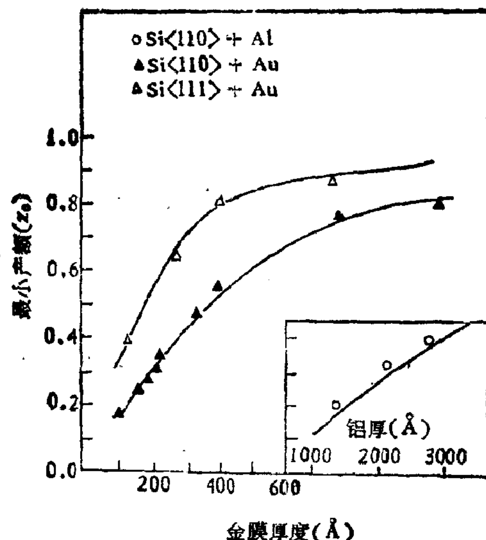


图 6.3-4　1.8 兆电子伏 He 沿着 Si⟨110⟩和 0.4 兆电子伏沿 Si⟨111⟩轴入射的计算和测量最小产额与其表面覆盖的金厚度之间的关系．右下角为 Si⟨110⟩ 上覆盖 Al 膜，1.8 兆电子伏 ^{4}He 入射

$$\chi_{\min} = P(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}, \tau) \tag{6.3-5}$$

给出，其中约化临界角由 (5.5-2) 式得出

$$\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}} = \frac{Ea}{2Z_1Z_2e^2}\psi_{\frac{1}{2}} \tag{6.3-5a}$$

而 τ 是约化厚度［见 (5.5-2) 式］，可看作粒子同厚度 x 原子密度 N 非晶层中 N_x 原子/cm² 碰撞的平均数目．而 $P(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}, \tau)$ 是粒子散射到约化临界角 $\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}$ 外的几率由 (5.5-6b) 式给出．图 6.3-3 给出的 $P(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}, \tau)$ 是由 f_1 表示的数值积分得出的．图 6.3-3(a) 表明当厚度 τ 一定时，退道随临界角的增加而减小，图 6.3-3(b) 则是临界角固定时，退道跟厚度的关系．

图 5.5-2 和图 5.5-3 等已经给出金刚石晶体上覆盖碳、铝和金等的情形．图 6.3-4 则给出硅晶上覆盖有铝和金的薄膜的实验结果与 $P(\tilde{\theta}_{\frac{1}{2}}, \tau)$ 多重散射计算结果一致．

另外，当薄膜厚度一定时，退道随入射粒子能量的增加而减

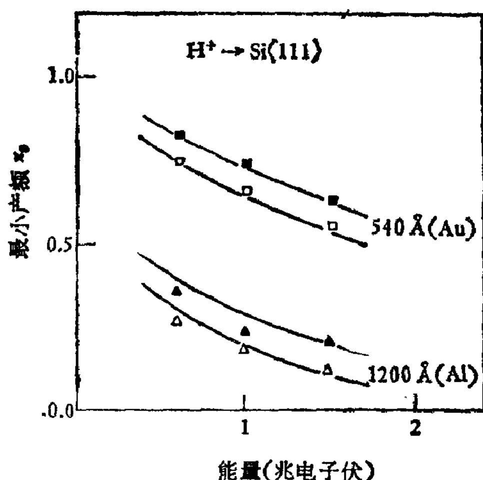


图 6.3-5 沿 Si⟨111⟩ 轴的最小产额 χ_{min} 同质子束能量之间的关系. Si 晶面上覆盖 540 Å 的 Au 和 1200 Å 的 Al. 靶温度 80K 为△和□，300K 时为▲和■

小. 影响这种能量关系有两个因素：临界角 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 和散射到固定角度外面的粒子数. 虽然临界角随 $E^{-\frac{1}{2}}$ 变化，但束流角分布随能量增加变窄比临界角减少来得快. 因此，当能量增加时，有比较少的粒子散射到临界角外面去. 图 6.3-5 给出最小产额同入射能量的关系.

三 位移原子的随机分布

离子注入半导体，在半导体靠近表面处的部分区域形成一个含有不规则原子分布的无序区域，如图 6.3-6 所示. 图中给出了兆电子伏 ^{4}He 离子入射到这种晶体上得到的定向和随机背散射谱. 在深度超过注入区域时仍有较高的产额是由于一部分沟道粒子为缺陷的小角偏转($>\psi_{\frac{1}{2}}$)所退道，这些退道了的粒子可以为晶体中任何原子所散射，从而对定向产额作贡献. 这与 § 5.5 和刚才讨论过的表面非晶层退道性质相同，只不过这里的不规则部分是在晶体的内部. 我们把背散射产额分成两部分贡献：自缺陷沟道部分的背散射和自晶体所有原子退道部分的背散射.

紧靠表面峰后退道的贡献最小，因此缺陷浓度由

$$N_D(0) = N\frac{\chi(0) - \chi_V(0)}{1 - \chi_V(0)} \tag{6.3-6}$$

式中N是本体密度（原子数/厘米^3），χ为损伤晶体中求出无序能量处的定向和随机产额之比，χ_V是没有损伤（未注入）晶体的产额比．在(6.3-6)式中，$(1-\chi_V)$表示沟道部分，$\chi(0)-\chi_V(0)=[1-\chi_V(0)]-[1-\chi(0)]$代表没有损伤和有损伤样品沟道部分之差．

利用低能^{4}He离子沟道和背散射方法分析400吉电子伏的高能质子在室温下辐照弯曲和不弯曲硅单晶所引起缺陷的浓度和类型[14]．发现在弯曲晶体中，朝着辐照束流的一面（凸面）的缺陷是另一面（凹面）的许多倍．图6.3-7给出辐照后晶体凸面和凹面的Si⟨111⟩方向背散射沟道谱和随机谱，未辐照的完整晶体的定向谱也划以示比较．入射束为2.0兆电子伏的$^4He^+$离子．图中还给弯曲晶体辐照示意图．由于晶体只有2mm厚，对于400吉电子伏能量的质子是透明的，可以认为没有质子停留在其中，

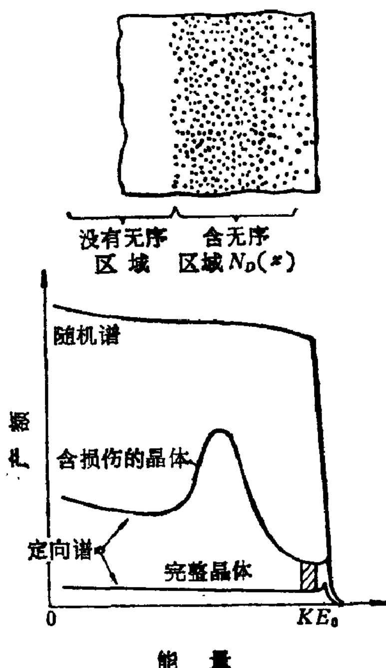


图6.3-6 (a) 晶体内含有不规则原子分布的无序区域，(b) $^4He^+$离子入射得到的定向谱和随机谱

只有质子引起的位移原子造成的缺陷．表6.3-2列出由(6.3-6)式计算出各种辐照情况使晶体产生无序程度．在辐照剂量为6×10^{16}质子/厘米^{2}时，未弯曲晶体朝着的一面具有稍高的缺陷损伤（⟨110⟩轴是0.87%，⟨111⟩轴是1.34%），凸面比背面的损伤约大四分之一．表6.3-2中的数据还表明，使晶体弯曲辐照并不会在晶

表 6.3-2　高能质子辐照 Si 单晶的无序参数 $\frac{N_D(0)}{N}$ *)

非弯曲晶体				弯曲晶体	
质子辐照剂量	6×10¹⁶ 粒子/厘米²		3×10¹⁵粒子/厘米²	1.6×10¹⁷ 粒子/厘米²	
测量位置	向面	背面	向面	向面（凸面）	背面（凹面）
⟨110⟩ 轴	0.87±0.21	0.64±0.20	0.32±0.18	1.23±0.14	−0.21±0.20
⟨111⟩ 轴	1.34±0.12	1.06±0.12		1.58±0.16	0.19±0.16

*) 无序参数用百分数表示，测量是用 3.0 兆电子伏 ⁴He⁺ 进行的.

体中产生较多的剩余缺陷. 例如，弯曲晶体受高能粒子辐照剂量为 1.6×10^{17} 粒子/厘米² 要比没有弯曲晶体所受辐照剂量（6×10^{16} 粒子/厘米²）大二倍多，但弯曲晶体的无序程度并没有增加那么多. 这可能是最初产生的间隙原子和空穴的复合行为在弯曲晶体的应力场中增强了.

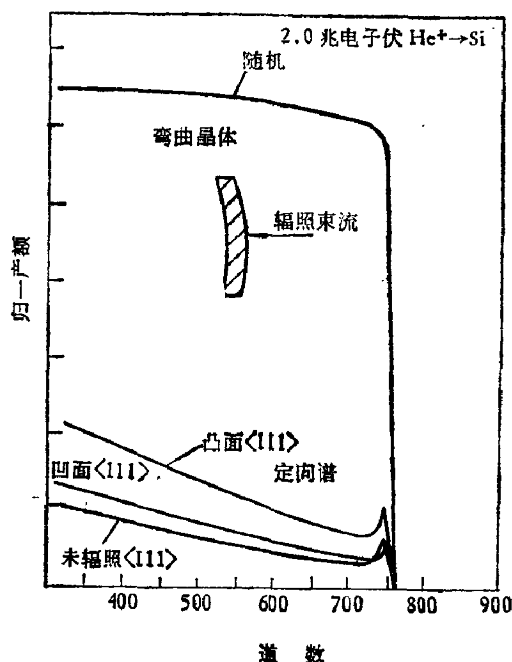


图 6.3-7　2.0 兆电子伏 He⁺ 离子对高能质子辐照弯曲晶体 Si 后测得 ⟨111⟩ 的沟道背散射谱. 未辐照样品的 ⟨111⟩ 定向谱也列入

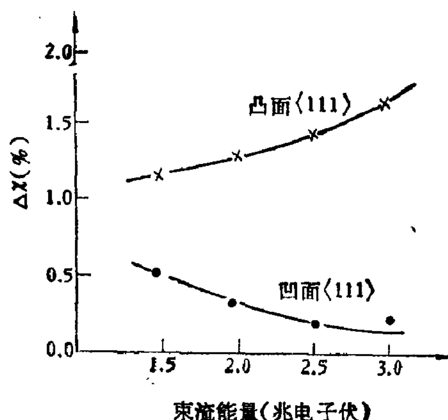


图 6.3-8 弯曲晶体辐照后剩余缺陷沿〈111〉轴退道产额同分析束 ^4He 能量之间的关系[14]. ×为凸面 ●为凹面

然而，在相同辐照剂量下，弯曲晶体凸面和凹面的剩余缺陷及损伤程度差别很大，即凸面的无序程度是凹面的许多倍. 甚至在凹面测量〈110〉轴向背散射谱中已经观察不到损伤了（—0.21±0.20). 这种现象在非弯曲晶体中是不曾有过的. 在进行与能量有关的沟道测量时，得到由缺陷引起的退道产额 $\Delta\chi$（$\Delta\chi$ 定义为辐照和非辐照样品在相同深度相同晶格方向上的退道归一产额之差）同分析束流能量的关系对于弯曲晶体的凸面和凹面是完全不同的，如图 6.3-8 所示. 凸面的退道产额 $\Delta\chi$（图中的×）随着分析束的能量增加而增加，而凹面的退道产额 $\Delta\chi$ 随 $^4He^+$ 离子的能量增加而减少. 由于沟道背散射的退道产额与入射粒子能量关系为 $E^{\frac{1}{2}}$ 表明可能是位错的贡献，为 E^0 的关系是层状缺陷、气泡或空穴，而与 $E^{-\frac{1}{2}}$ 的关系是间隙原子的贡献. 我们的实验还不能肯定那一种缺陷类型是主要的，但是凸面(张应力)和凹面(压应力)剩余缺陷的类型(也可能是浓度)是显著不同的. 这种弯曲晶体应力场使辐射缺陷宏观分离现象有一系列重要的涵义[15]：(i) 提供把间隙性缺陷和空穴性缺陷分开的可能性；(ii) 在离子注入合金或扩散层的边缘和内边界处产生较大的应力场可引起缺陷的分离，从而影响到缺陷在这物质中的最终分布；(iii) 在晶体表面和表

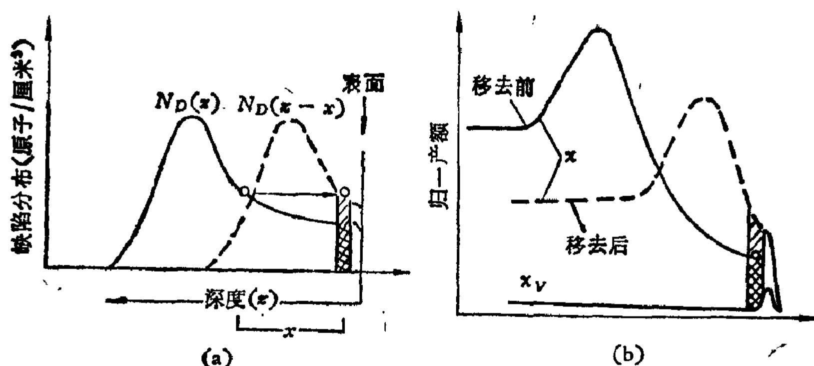


图 6.3-9 利用剥层方法确定晶格无序分布. (a) 实线给出原样中的无序分布，虚线是剥层后的分布. (b) 剥层前后定向谱

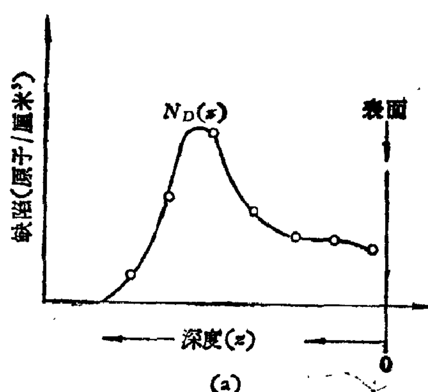
面、表面和交界面的应力场可能增强或阻碍缺陷从表面(或界面)或向这些区域移动.

一般离子注人引起的辐射损伤是局域的，即样品中含有一个无序分布区域 $N_D(z)$，如图 6.3-6 所示. 在 (6.3-6) 式求出表面层的无序数量之后就可以求出深度 z 处的情况. 一种办法是一层一层剥去表层并测量表面的损伤. 例如图 6.3-9(a) 是含有损伤分布的 $N_D(z)$. 在表层除去前的归一产额 x 由图 6.3-9(b) 的实线所示. 圆点和影线区域代表表面层位移原子的数量. 在样品除去一定的厚度 x 后，再测定向谱[图 6.3-9(b) 中的虚线]. 圆圈代表新表面上无序量度，这样就给出 $z=x$ 处的 N_D 值. 经一系列这种测量就可确定 $N_D(z)$.

另一种办法是采用迭代法来求无序分布. 假定束流粒子在晶体中发生作用可分成两部分：沟道粒子可同位移原子发生作用和随机部分能被晶体中任何原子散射. 于是在深度 z 处的归一散射产额由 (5.4-49) 式给出，

$$\chi(z)=\chi_R(z)+(1-\chi_R(z))\frac{N_D(z)}{N} \qquad (6.3\text{-}7)$$

$\chi_R(z)$ 是 z 处退道粒子的百分数（这些粒子可同所有的晶格原子起作用），$[1-\chi_R(x)]$ 是沟道粒子的百分数（这些粒子可同 $N_D(z)$ 位移原子作用）. 退道百分数 χ_R 常常系指准直束的随机分量，



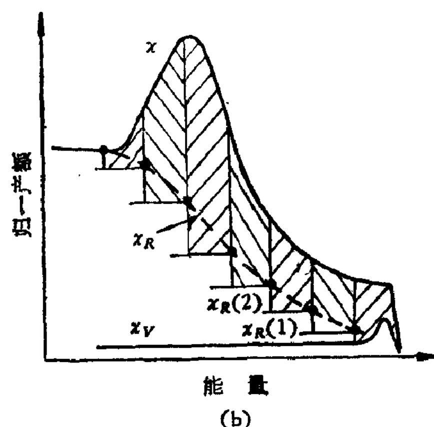


图 6.3-10 用迭代法确定样品中退道额：(a) 实线和圆圈表示样品中无序分布，(b) 实线给出定向背散射谱 χ. 在 (b) 中，$\chi_R(1)$ 的值是表面层厚度 Δx 中位移原子 $N_D(0)$ 所引起的退道额. 从 χ 和 $\chi_R(1)$ 之间的面积确定下一层中的位移原子数 $N_D(1)$，虚线给出准直束的随机分量(退道百分数)，影线面积代表位移原子的浓度 $N_D(x)$

如图 6.3-10(b) 所示.

于是，基本问题就归结为确定随机分量 $\chi_R(x)$ 与深度的关系. 由 (5.4-57) 式可知这种退道分数近似表示成

$$\chi_R(x) = \chi_V(x) + [1 - \chi_V(x)]P(x) \qquad (6.3\text{-}8)$$

$\chi_V(x)$ 是完整晶体(没有损伤)在深度 x 处的定向产额. $P(x)$ 是沟道粒子为表面和深度 x 之间缺陷引起退道几率. 它假定由缺陷引起

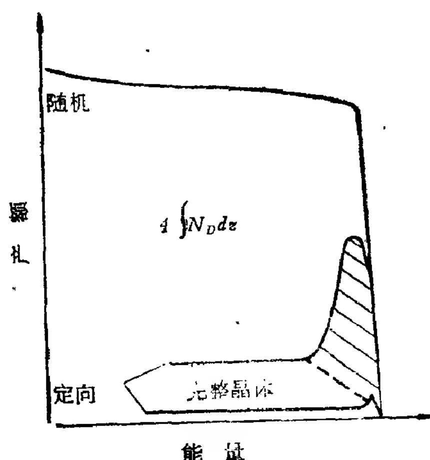


图 6.3-11 损伤接近晶体表面处的分析．虚线表示退道的贡献，峰下的面积(影线区域)正比于单位面积位移原子的数目

的退道是线性地加到没有缺陷的完整晶体退道上．其值可以通过确定完整晶体上叠加一个非晶层引起的退道产额来求出，即方程(6.3-5)．采用(6.3-3)式的点缺陷的散射截面和单散射模型，把$P(\psi_{\frac{1}{2}})$看成一个粒子穿过厚度x(含原子数Nx)被散射到角度大于$\psi_{\frac{1}{2}}$的几率，即

$$P(\psi_{\frac{1}{2}}) = \sigma_D(\psi_{\frac{1}{2}})Nx \tag{6.3-9}$$

或者由复散射模型[(5.4-63)式]给出．

迭代步骤示于图 6.3-10：将定向产额分成若干厚度相等的增量Δx并假定每个增量中损伤是相同的，就可从方程(6.3-7)确定表面第一个增量中位移原子数$N(0)\Delta x$，然后计算退道几率$P(x)$并从方程(6.3-8)算出$\chi_R(x)$的值．测量χ后就能从方程(6.3-7)求出缺陷浓度$N_D(1)$，进而得$\chi_R(x)$．这个步骤继续迭代以确定下一层中的$N_D(x)$．图 6.3-10(a)中的圆圈代表$N(i)$的值，曲线就是缺陷浓度分布曲线．

如果损伤区域是靠近表面并且在定向背散射谱中有一个很突出的表面峰，这时确定位移原子数目的步骤就简单得多了．方法是用一直线近似表示退道，然后从影线部分的面积得到损伤原子

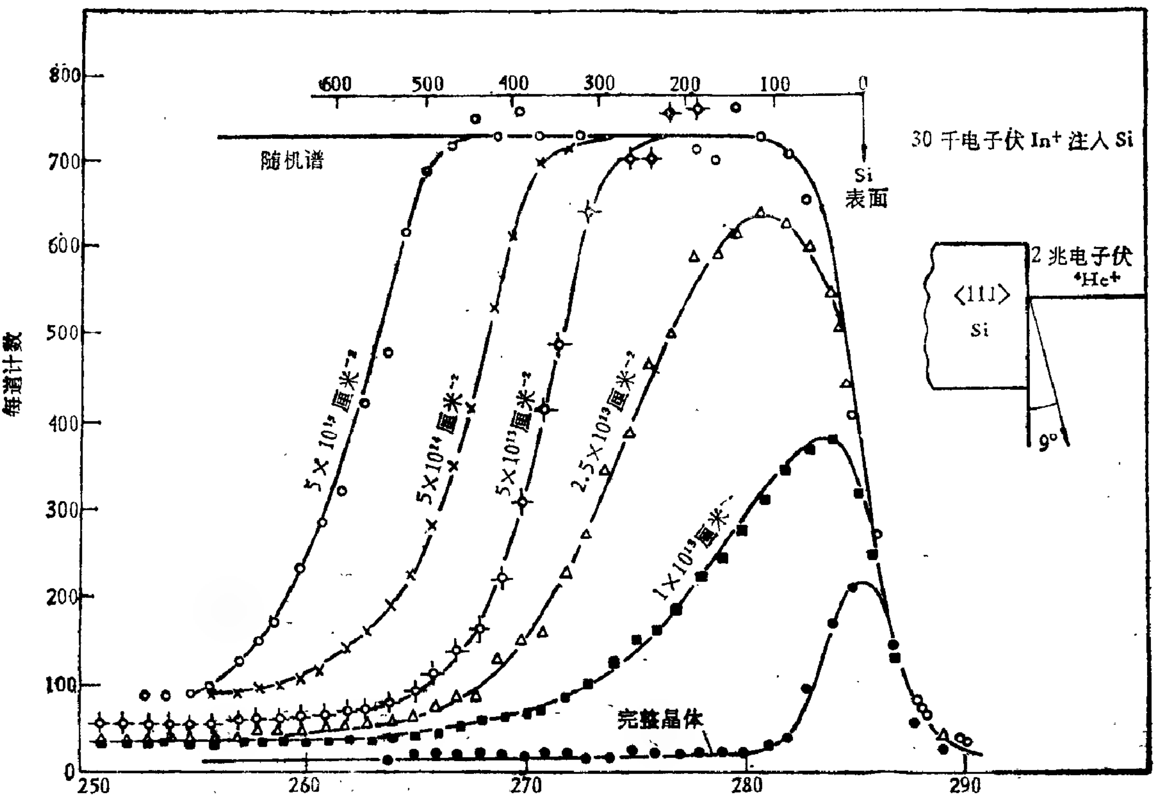


图 6.3-12　不同剂量的 In 注入 Si，得到随机和〈111〉方向的背散射谱[16]

的数目．如图 6.3-11 所示。

从定向谱的分析中还可以得到位移原子的深度剖面同人射离子剂量之间的关系．图 6.3-12 是能量 30 千电子伏但剂量不同的 In 注人 Si 后测得 Si⟨111⟩ 的定向谱[16]．随着离子剂量的增加，无序原子首先在最可几注人深度(30 千电子伏 In 注人大约是 130 Å)达到饱和．然后深度的间隔加宽．饱和的程度与非晶层形成是直接相关的．

从沟道背散射产额中获取缺陷浓度剖面的数据有几个假定：(i) 位移原子是随机分布的；(ii) 在引入无规则原子后，晶体本体的临界角 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 不变；(iii) 退道粒子不会返回到沟道中来；(iv) 缺陷引起的退道是加到晶体原子的电子和原子核热振动引起的退道上的；(v) 沟道粒子的阻止能力不依赖位移原子．第 iv 个假定是忽略了缺陷引起的小角散射和晶格原子热振动及电子引起小角散射同时发生的可能性．如果考虑到这一因素，得到的缺陷浓度会少一些．研究这个问题有两个不同的途径：一是用横动量空间的扩散过程来描述退道，二是用沟道粒子横能量稳定增加模型给出退道的近似分析式．这就 § 5.4 所讨论的内容．一般来说，沟道粒子在沟道中心的阻尼能力比随机束的要低．它意味着随机产额和定向产额应有不同的深度标度．而且，还要考虑卢瑟福散射定律对粒子能量的变化．不过，在缺陷分析中定向产额和随机产额均用相同的阻止能力．实验表明这是合理的，因为退道粒子的阻止截面和随机束的阻止截面差不多．

四　考虑沟道效应的位移原子分布

沟道束在原子列之间的沟道内不是均匀分布——通量峰效应．所以上述的方法得到缺陷浓度代表缺陷分布为沟道离子通量所权重的平均值．

$$N_D(z) = \int N_D(x, y, z)F(x, y)dxdy \qquad (6.3\text{-}10)$$

其中 $F(x, y)$ 是沟道粒子在沟道中的空间分布 [(5.2-37) 式]，

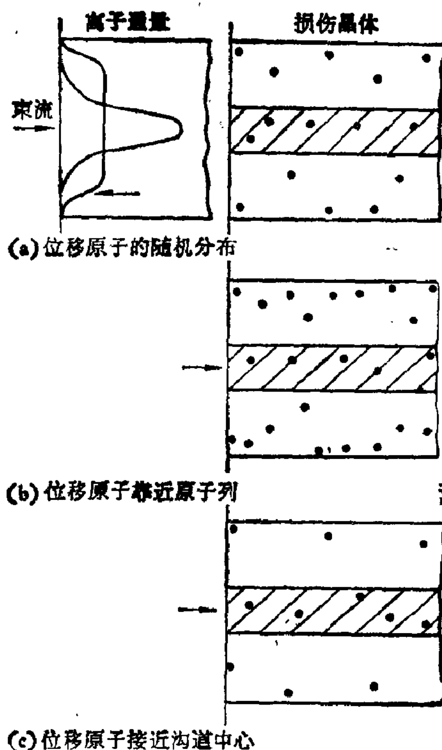


图 6.3-13 缺陷分布不同但在沟道中心影线部分位移原子数目相同. 左上角为两种不同倾角时沟道粒子通量示意图

$N_D(x, y, z)$ 是位移原子的空间分布. 积分是对沟道面积积分(图 5.2-6). 图 6.3-13 示出三种损伤分布，它们在沟道中心具有相同的缺陷密度(位移原子)，而在原子列附近密度不同. 沟道粒子束主要是探测沟道中心处势能低的区域的损伤. 因此，虽然这三种情况总的位移原子数不同，但是在缺陷上的散射产额却相同.

把 § 6.2 确定杂质原子定位中的通量峰效应推广到主晶格原子位移的情况. 根据图 5.2-13 所示的情形，得到沟道粒子同位移原子相互作用依赖于通量分布和缺陷位置. 图 6.3-14 给出 2.0 兆电子伏 $^4He^+$ 分析束在 Ge 中几种倾角下产额同⟨111⟩原子列距离的关系，在所有情况下靠近原子列位置的位移原子相互作用几率

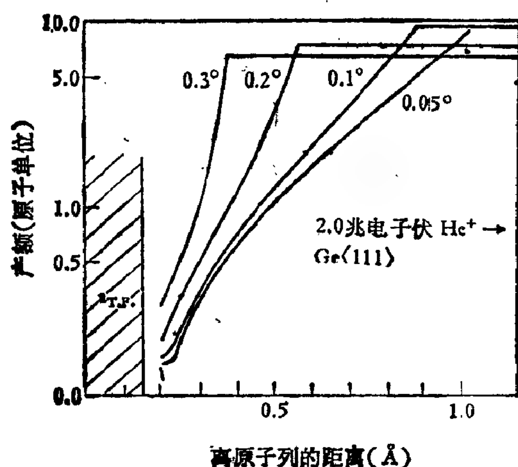


图 6.3-14　2.0 兆电子伏 $^4He^+$ 在 Ge 中几种倾角下位移原子产额同 ⟨111⟩ 原子列距离的关系

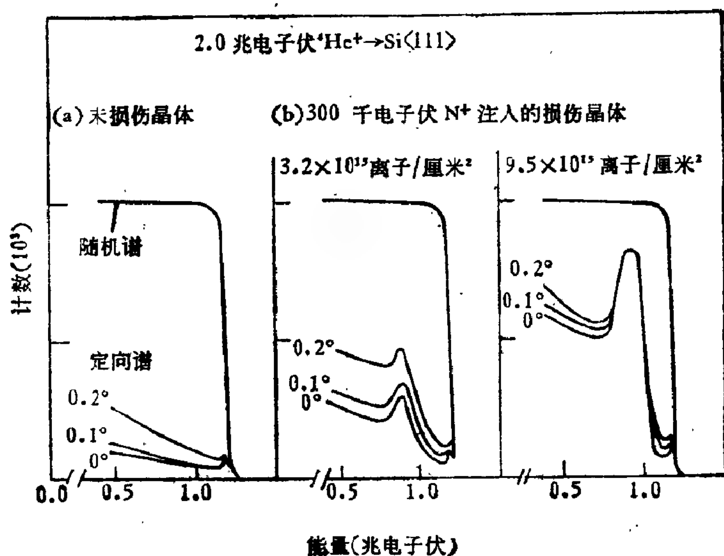


图 6.3-15　2.0 兆电子伏 He^+ 自硅晶上背散射能谱：(a) 未损伤的 Si 单晶，(b) 剂量分别为 3.2×10^{15} 和 9.5×10^{15} 离子/厘米²的 300 千电子伏 N^+ 注入 Si 的损伤晶体定向谱是束流相对于 ⟨111⟩ 轴的 0°、0.1° 和 0.2° 测得的[17]

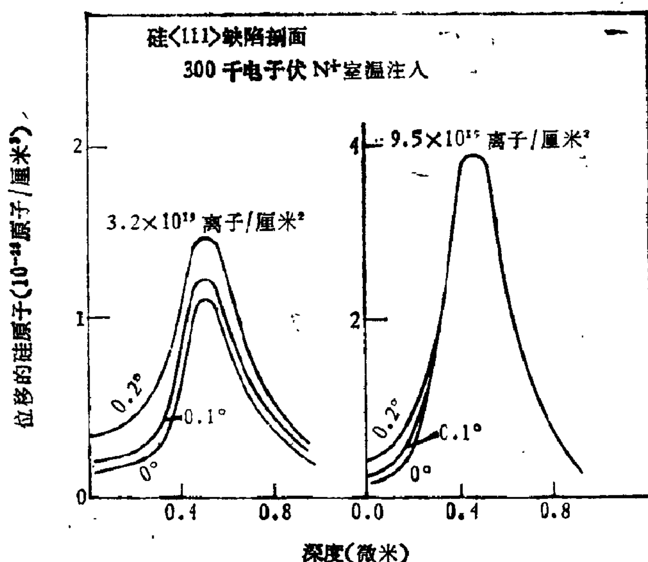


图 6.3-16 剂量为 3.2×10^{15} 和 9.5×10^{15} 离子/厘米²能量为 300 千电子伏 N^+ 注入 Si 的缺陷剖面[17]

都减少. 不过沟道方法对位移原子在零点几埃内(离原子列位置)是不灵敏的.

这里用离轴分析法来讨论 300 千电子伏 N 注入 Si 中产生的损伤[17]. 图 6.3-15 示出相对于 Si〈111〉轴不同倾角得到的背散射谱. 剖面与角度相关而且表明散射中心在沟道中分布是不均匀的. 当缺陷是随机分布时得到剖面与倾角无关. 假定沟道粒子在可接受的面积 A_i (依赖于倾角)内是均匀分布的,那么缺陷在沟道中的分布可用减法得到. 完全准直时, 缺陷 $N_D(z, 0)\ \Delta z$ 分布在面积 A_0 内;倾角为 θ_1 时 $N_D(z, \theta_1)\Delta z$ 分布在面积 A_1 内. 两者之差 $|N_D(z, \theta_1) - N_D(z, 0)|\ \Delta z$ 给出深度 Δz 内分布在面积 $(A_1 - A_0)$ 的缺陷数目.

利用上述步骤得到两个不同深度间隔的缺陷径向分布, 如图 6.3-17 所示. 当注入剂量为 3.2×10^{15} 离子/厘米²时, 位移原子密度在所有的深度从沟道中心到原子列逐渐增加; 当注入剂量为

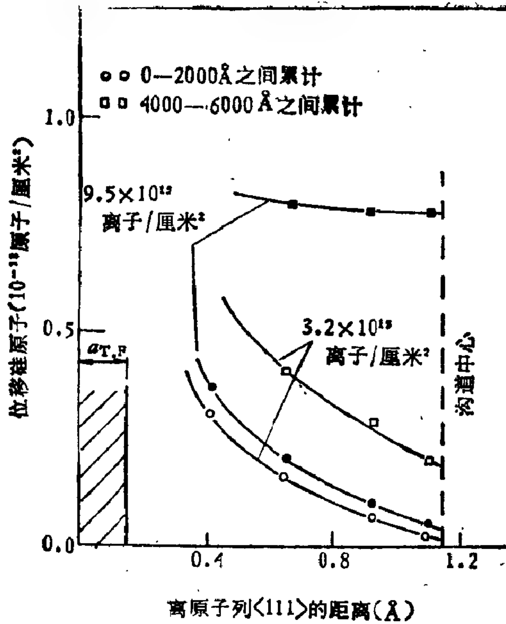


图6.3-17 两个不同深度范围内位移原子的径向分布：0—2000Å和4000—6000Å，注入剂量是 3.2×10^{15} 离子/厘米²和 9.5×10^{15} 离子/厘米²的300千电子伏 N^{+}[17]

9.6×10^{15} 离子/厘米²时，缺陷的不均匀分布仅出现在0（表面）—4000Å的深度范围内，再深时位移原子则是随机分布的.

假定统计平衡时求出离子通量且与深度无关，那么缺陷散射使离子沟道分布展宽了，结果通量峰逐渐变平了. 当2.0兆电子伏 He^{+} 离子束穿过无序区域为 5×10^{17} 位移原子/厘米²时离子的分布就与倾角无关了. 所以，注入剂量为 9.5×10^{15}/厘米² 时深度到达约4000Å左右位移原子的分布就可能是随机的了. 当然也有可能是通量剖面因缺陷的小角散射而变平.

最后，应指出这种方法所提供的是位移原子离原子列的均方距离.

五 位错退道

晶格的损伤常常是由复杂结构的缺陷组成的. 这些晶格变形

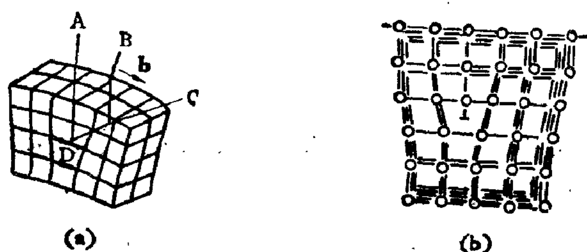


图 6.3-18 (a) 多加了半个原子平面 ABCD 产生刃型位错，(b) 沿位错方向的投影图

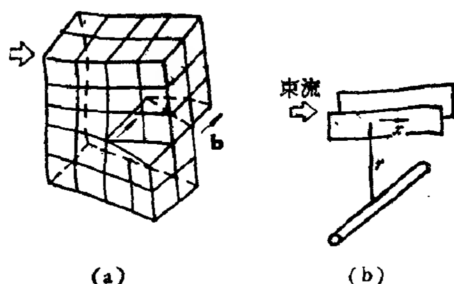


图 6.3-19 (a) 晶格平面横向位移形成螺型位错示意图；(b) 螺型位错变形沟道示意图

往往主要使粒子退道，而不是直接产生背散射．在几种复杂缺陷中首先讨论位错对沟道粒子的影响．

晶格在本征刃型位错中对应于多出的半个原子平面，其伯格斯矢量 (Burgers vector) **b** 垂直于位错线 CD 线(图 6.3-18)．螺型位错则对应一系列螺蜷原子面的中轴，如图 6.3-19 所示，其伯格斯矢量平行于位错线．

确定位错引起退道的基本方法是讨论晶格形变对沟道粒子轨迹的影响． 图 6.3-20 示出二维刃型位错示意图． 粒子以垂直位错线的方向进入因原子平面弯曲而变了形的平面或轴沟道．变形给沟道粒子的横向运动加上了一个离心力．如果 R 是曲率半径的最小值，最大横向力是

$$F_{\perp}=\frac{2E}{R} \tag{6.3-11}$$

那么，$F_{\perp}$ 和林哈德原子列势给出的力在离原子列一定距离 r 处

达到平衡，即

$$\frac{2E}{R}=\frac{2Z_1Z_2e^2}{rd} \tag{6.3-12}$$

当 r 的数量级为 a 或热振动振幅时，就会发生退道。这时 r_c 的值给出临界曲率半径 R 的定义。当曲率半径达到 R 时，离位错的距离 r_0 就给出退道半径。根据位错线周围应力场的弹性理论在位错退道宽度为

$$\sigma_D=2r_0 \tag{6.3-13}$$

时有

$$\sigma_D=\left[\frac{bdaE}{\alpha Z_1Z_2e^2}\right]^{\frac{1}{2}}=\left[\frac{ba}{\alpha\psi_1^2}\right]^{\frac{1}{2}}\approx\frac{\sqrt{ab}}{\psi_1} \tag{6.3-14}$$

式中 b 为伯格斯矢量的数值，而且

$\alpha=12.5$ 直的螺型位错，

$\alpha=4.5$ 直的刃型位错，

$\alpha=7.2$ 螺型位错和刃型位错数目相等。

注意，以前利用记号 λ 表示退道因子 σ_D 即退道圆柱直径（$\lambda=2r_0$）[18,19]，因为 λ 的单位是距离。这里采用 σ_D 是为了统一处理缺陷退道问题。其含义是高距位错距离 r_0 处平面变形所倾斜角度达到临界角 $\psi_{\frac{1}{2}}$ 时就退道了。当临界角为典型值(～1°)时，螺型位错和刃型位错的退道因子 σ_D 都是 ～100 Å。在实际晶体中，位错密度的范围可以从基本上没有位错的硅单晶到某些冷加工金属中的位错密度出现 10^{10}—10^{11}/厘米^2。在 $\sigma_D\approx100$ Å 和 $N_D\approx10^{10}$/厘米^{2}时大约有 10% 的入射束在穿过晶体深度 1000 Å 后被位错退道了。实验上已经可以测出这种退道量级。

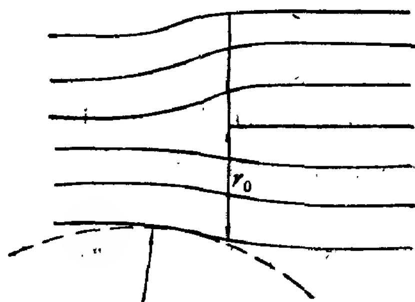


图 6.3-20 二维刃型位错示意图

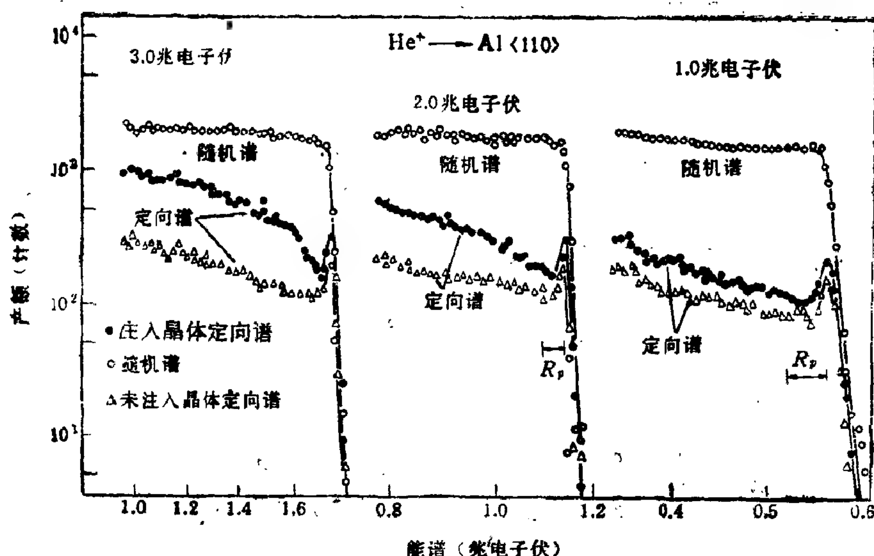


图 6.3-21　3.0、2.0 和 1.0 兆电子伏 $^4He^+$ 入射到 Al⟨110⟩ 轴得到定向背散射能谱，包括注入和非注入的晶体[20]

不同能量入射束的沟道背散射方法研究 Zn 注入 Al 单晶的损伤，考察退道截面的函数关系．图 6.3-21 是未注入和 150 千电子伏 Zn 注入 Al（剂量为 1.2×10^{16}/厘米^2）的背散射能谱．在注入晶体中，在大约是投影射程两倍的深度之内定向产额增加很快，表明存在很高的无序度．超过这个深度时退道率减少，这一点可以从 3.0 兆电子伏 $^4He^+$ 入射到⟨110⟩上的谱中出现"膝"看出．

图 6.3-21 中的一个重要之点是，随着 $^4He^+$ 束轰击能量的增加，定向谱的相对产额增加，这与图 6.3-5 所示的情形正好相反．它表明引起这里退道的损伤分布已不能用随机分布来描述．定向谱没有如图 6.3-6 中的无序峰也表明缺陷不是随机分布的．晶格原子有小的位移或位错会导致退道增加但不能直接散射而形成无序峰．

在定向谱没有峰的情形（图 6.3-21）下，直接散射的贡献很小．因此，退道百分数同束流的随机分量符合，也即 $\chi_D \simeq \chi_R$．如

果仍采用退道因子 σ_D（表 6.3-1），则从方程 (6.3-8) 得

$$\frac{dP_D}{dz} = N_D(z)\sigma_D = -\ln\frac{1-\chi_D(z)}{1-\chi_V(z)} \qquad (6.3\text{-}15)$$

位错退道因子 σ_D 与临界角成反比 [(6.3-14) 式]，因此，平面退道因子大于轴向．图 6.3-22 示出 1.0 兆电子伏 $^4He^+$ 在硅的刃型位错中运行情形，其中图 6.3-22(a) 给出原子的位置，图 6.3-22 (b) 示出轴向和平面退道因子，其标度是每 7 个平面中有一个．图 6.3-23 是用不同能量入射粒子测量 Si⟨111⟩ 轴和 (110) 面两个方向的位错退道率同入射粒子能量的关系．$N_D(z)\sigma_D$ 是由 (6.3-15) 式得到的．在面沟道情况下，$\frac{dP_D}{dz}$ 与 $(E/Z_1)^{\frac{1}{2}}$ 关系是很明显的．

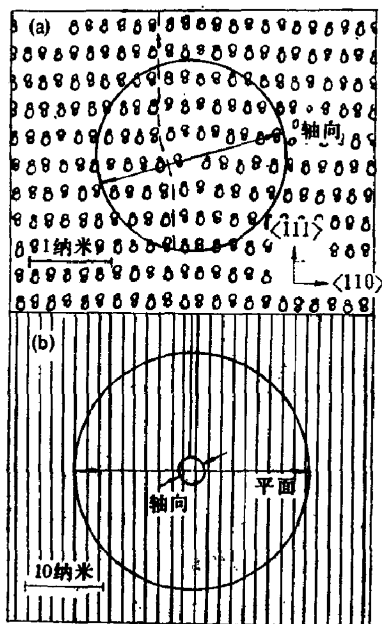


图 6.3-22 (a) 根据经典弹性理论得到 Si 中 [110] 刃型位错时原子在(1̄1̄2)平面上的投影位置和轴向沟道的退道因子；(b) 比例比 (a) 缩小(即 7 个原子平面只推一个)．(110) 面向的退道因子[13]

上述处理忽略了沟道粒子的通量分布．比较严格的讨论是一定沟道中粒子的轨迹同其位置的关系，然后把位错附近一定体积内所有沟道的贡献加起来．理论上可根据连续模型的理论框架求解粒子在变形沟道中的运动方程[21,22]．图 6.3-24 是沟道粒子位置和角度为统计平衡分布时计算的退道几率同离位错核心的距离的关系．曲线下的面积定义单个位错对退道的总贡献．这种线性缺陷的退道因子定义为单位长度上退道的面积，如图6.3-24 的虚线所示．在图 6.3-18 的几何形状中，1.0 兆电子伏的 He^+ 沿 Si (110) 入射且 $b = 2d_p$，上述轨迹计算给出 $\sigma_D = 380$ Å．而方程 (6.3-14) 式得到 $\sigma_D =$

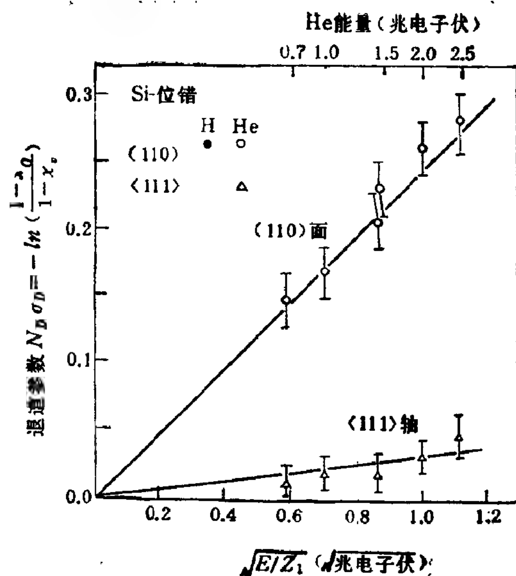


图 6.3-23 实验测量缺陷密度和退道因子的乘积同束流能量(除以入射束的原子序数 Z_1）的平方根之间关系，即 Si 中刃型位错在(110)和⟨111⟩方向上的退道[13]

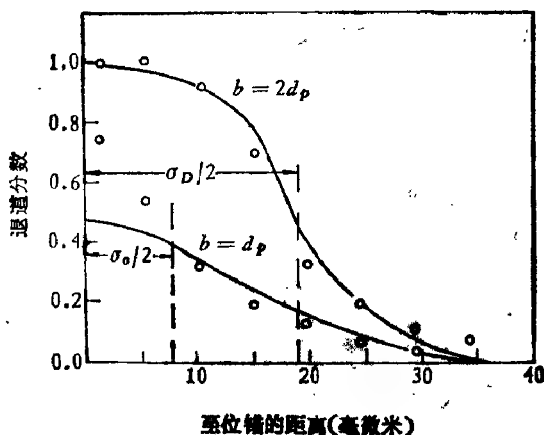


图 6.3-24 理论上束流退道分数同[110]刃型位错距离的关系，伯格斯矢量 b 等于平面间距或者是它的两倍. 1.0 兆电子伏 He^+ 沟道沿(110)平面含有如图 6.3-18 所示的 AD 方向的位错. 实线相应于谐振势计算轨道近似模型，圆圈对应于莫勒尔势的数值解.曲线下的面积积分，得到退道因子之半 $\sigma_D/2$，它表示粒子退道的有效宽度

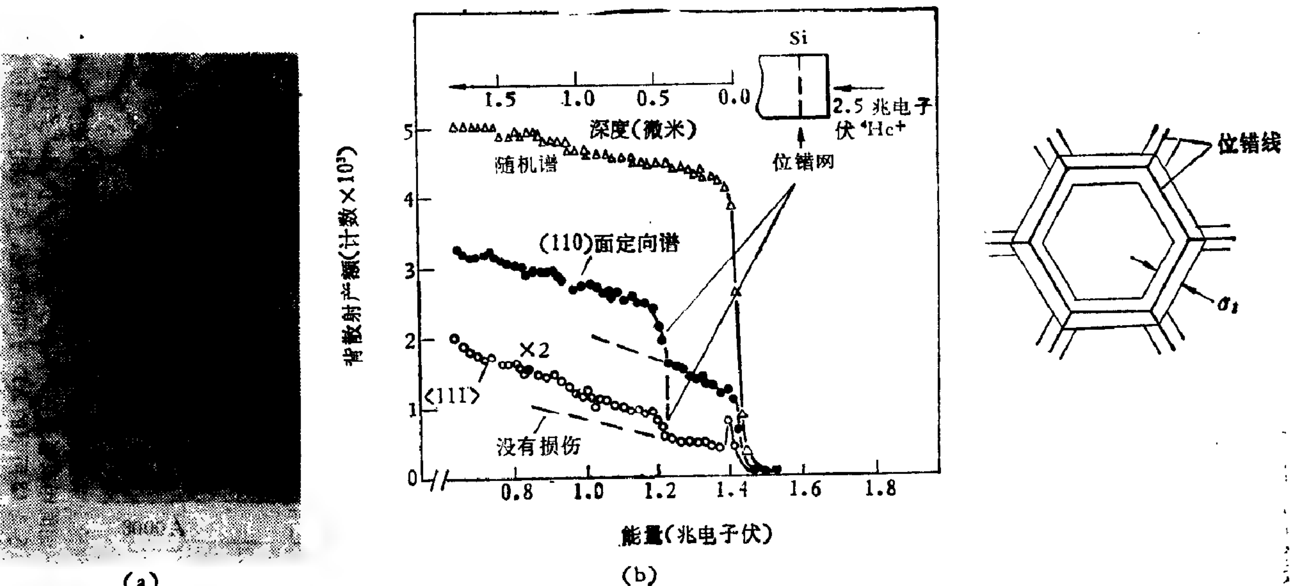


图 6.3-25 P扩散到 Si 中的位错分析: (a) 透射电子显微镜照片和 Si 中刃型位错网示意图; (b) 2.5 兆电子伏 ^4He 入射到 Si<111> 轴和(110)面的背散射谱,表明在表面下深度≈4500 Å 处出现刃型位错网. 注意<111>轴向计数增了一倍.

280 Å.

一般来说，处理孤立的线位错是很少的，常常遇到的情形是位错网. 例如，图 6.3-25 示出 P(磷) 扩散到 Si 中所出现的刃型位错网[23]. 它是将 P 以剂量为 10^{16} 厘米$^{-2}$注入 Si，然后在 1323K 温度下退火将 P 扩散到晶体中去. 在 P 浓度剖面的尾部由于 P-扩散区域内晶格收缩而产生有规律的刃型位错网. 图 6.3-25(a) 的透射电子显微镜的照片可以清楚地看出位错网. 图 6.3-25(b) 给出 2.5 兆电子伏 ^{4}He 沿 Si(110) 面和〈111〉轴的沟道背散射谱. 在深度约 4500 Å 处两个定向谱都出现一个"台阶"，对应于刃型位错引起的退道. 平面定向谱的"台阶"大约是轴定向谱 (图中轴向背散射谱的计数增大一倍以示清楚)"台阶"的四倍；面沟道的临界角是轴沟道临界角的 $\frac{1}{2.7}$. 显然，如同方程 (6.3-14) 所示的那样，平面沟道情况下的退道因子大，因而对位错探测的灵敏度也增加.

用弯曲晶体导向高能带电粒子的透射沟道实验可更为有效地讨论粒子在曲平面沟道中的退道问题 (图 5.4-4)[24]. 理论上还没有完全解决，而实验上常常定义一个退道长度来唯象表示，

$$n(z) = Ae^{-\frac{z}{\lambda}} \tag{6.3-16}$$

式中 $n(z)$ 表示在深度 z 处仍然存活在沟道中的粒子数目，A 是与初始位置有关的常数. 在 4.5 毫弧度弯曲情况下，8.4 吉电子伏质子在 Si(111) 曲平面沟道得到的退道长度为 $\lambda = 0.86 \pm 0.05$ 厘米，与艾利逊 (Ellison) 计算结果比较符合[31].

六　堆垛层错和孪晶

堆垛层错是一种面缺陷，相当于在晶格堆垛次序增加或减少了原子平面，即缺陷的边界处原子列或平面是不连续的，如图 6.3-26 所示. 这种边界代表退道截面类似于晶体表面的内表面. 它对退道的贡献可用缺陷阻挡的表面积来表示，也即是说，退道截面正比于堆垛层错的投影表面积. 图 6.3-26(b) 给出图 6.3-26(a) 情形的堆垛层错引起界面连续势的变化，在原来的势谷处出现了

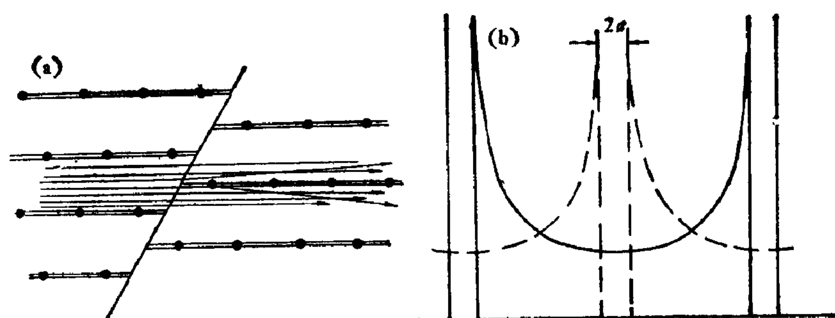


图 6.3-26 (a) 离子在堆垛层错边界处为内表面散射示意图；
(b) 堆垛层错引起界面连续势的变化

势峰．因而临界角变小，退道分数至少是原来的两倍(在考虑通量峰效应时会更大)．

由于面缺陷的散射因子代表单位缺陷面积的退道截面，故在均匀通量密度下退道因子可由

$$\sigma_D \simeq \chi_{min} \tag{6.3-17}$$

给出（见表 6.3-1)．这种关系既适用于面沟道方向也适用于轴沟道方向，并且，在最小产额的情形下退道因子同入射粒子的能量关系很弱．

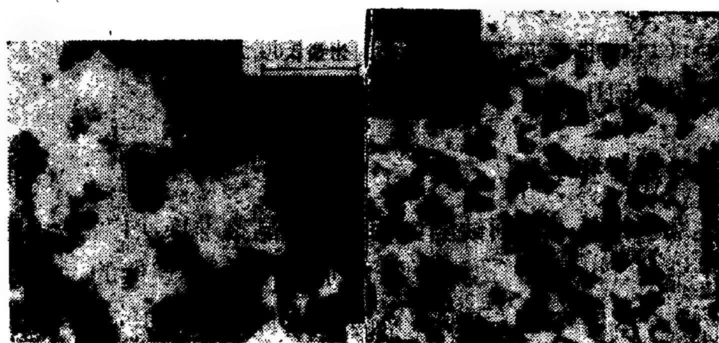


图 6.3-27 (a) 预退火样品经 2.0 焦耳/厘米²辐照后暗视场的电子显微照片，呈现堆垛层错四面体[25]．(b) 2.5 焦耳/厘米²激光辐照的注入样品的亮视场电子显微照片，呈现本征层错

例如，(111)Si 单晶在液氮温度下用各种能量的 Si 离子注入产生 4500 Å 厚的非晶层，然后用红宝石激光脉冲（脉冲周期为 15 纳秒，能量密度为 1.5 和 3.0 焦耳/厘米²）进行退火．样品一部分还在真空（10^{-5} 托）下 450℃ 预退火 30 分钟用 2.0 兆电子伏 $^4He^+$ 背散射和沟道效应以及 125 千电子伏的透射电子显微镜来研究辐照层的特性[25]．图 6.3-27(a) 是 2.0 焦耳/厘米²预退火样品的电子显微照片，呈现本征型(四面体)堆垛层错，具有 1/6〈110〉型的棒杆位错，这些封闭结构以四面体边缘为界．面缺陷沿相等的{111}面几乎是均匀分布的．图 6.3-27(b) 是没有经过预退火处理的样品在亮视场的电子显微镜照片．可以看出存在密度很高的本征型堆垛层错，数量级远大于图 6.3-27(a) 的情形．而且，以肖克利(Shockley)位错为界．缺陷表面积比预退火样品的值小 50%．

图 6.3-28 是沟道背散射分析．直至 1.8 焦耳/厘米²,〈111〉定

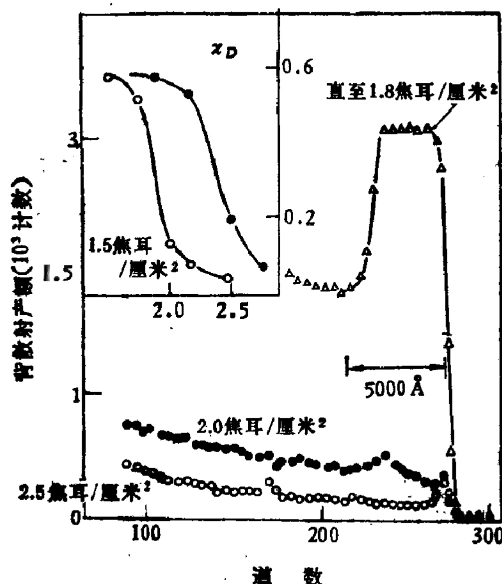


图 6.3-28 2.0 兆电子伏 He^+ 入射到激光辐照样品 Si〈111〉方向背散射能谱．左上角插入的图是 5000Å 处求出的归一产额 χ_D 同激光能量的关系：圆圈是样品经过 450℃ 的 30 分钟预退火，圆点没有预退火

向谱产额均同注入的晶体一样，表明没有任何外延生长．表面产额达到随机产额，能宽约 210 千电子伏，相当于 4500 Å．但是，当激光脉冲的能量增加到 2.0 焦耳/厘米²时，定向谱下降了，表面峰后面的最小产额是 9.3%． 显然这比没有注入的样品最小产额要高许多，这表明，在再生层中仍然存在剩余无序．而当激光能量为 2.5 焦耳/厘米² 时沟道测量所给出的最小产额为 4.3%，这表明表面层已经几乎没有缺陷了．

图 6.3-28 左上角插入的图是深度 5000 Å 处的归一产额 χ_D．χ_D 同激光能量密度的关系证明激光重序化存在着阈值性质．对于预退火硅样品，从非晶到单晶的相变发生在 2.0 焦耳/厘米²处．对于没有预退火样品 χ_D 的值（在上角插图中的圆点）和预退火样品的趋势相同，但晶体的重序化发生在 2.8 焦耳/厘米²以上．

由透射电子显微镜和沟道背散射研究激光退火对注入硅的有序度的影响，表明在激光能量密度阈值以下（预退火样品为 2.0 焦耳/厘米²和未退火样品为 2.8 焦耳/厘米²），辐照层为多晶结构．当激光能量密度很高时，辐照层则不再有扩展缺陷，只有少数 V 型位错线；而在阈值附近，形成大量的堆垛层错．

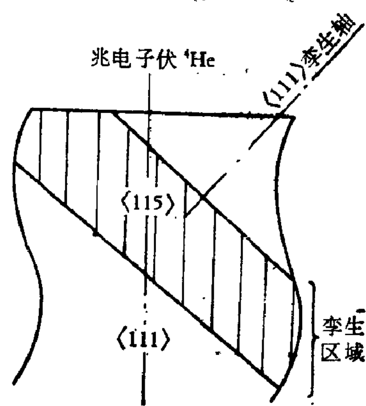


图 6.3-29 在（111）面上含有孪生区域的 Si 晶〈111〉示意图．在孪晶区域，〈115〉轴平行于垂直表面的〈111〉轴

孪晶与堆垛层错不同，是相对于基体有特定取向的一块材料．一般来说，基体与孪晶存在对应关系．如，孪生平面的镜象反演或晶体绕孪生轴有一定角度的转动． 在共格孪晶中，主晶和孪晶之间的晶格完全匹配．沿着主晶中的低指数轴，孪生区域可看成理想晶体，但晶向指数高的方向．可从立体投影确定从未孪生转到孪生材料时晶体从一个方向变化到另一个方向．例如，对〈111〉孪生轴的 180° 转动可把〈100〉方向转到〈221〉方

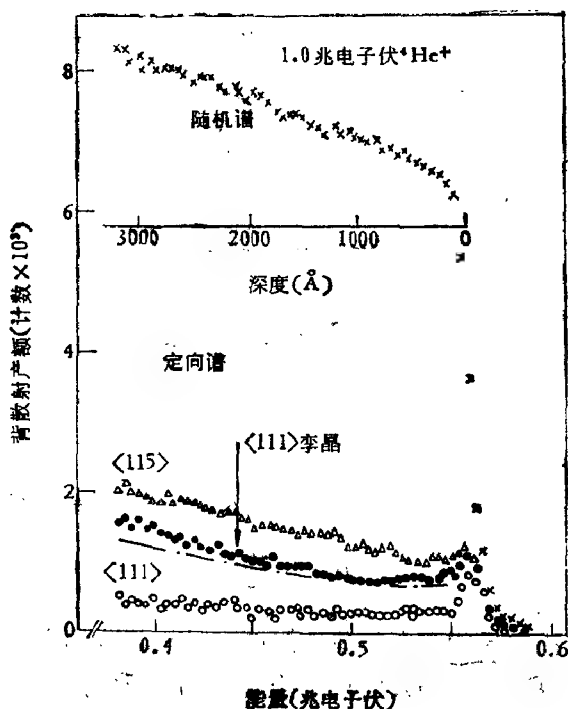


图 6.3-30 1.0 兆电子伏 He^+ 对 Si〈111〉和 Si〈115〉以及含孪晶 Si 晶的沟道背散射谱. 虚线表示若晶体含有 50% 孪生区域的预计值[26]

向，而且三个不在孪生轴向的〈111〉方向会转到〈115〉. 图 6.3-29 所示的 Si 晶，在其 (111) 面上有孪生区域[26].

孪晶的主要贡献是孪生区域内退道率的变化. 晶向的指数愈高，退道率 $\frac{d\chi}{dz}$ 也愈高，临界角愈窄. 退道率随 d^2 变化，d 是原子列上的原子间距. 图 6.3-30 示出 Si〈111〉和 Si〈115〉的定向产额: Si 中〈115〉轴的退道率约比〈111〉轴的退道率大一个数量级. 图 6.3-30 中还示出含有 50% 体密度孪晶样品的定向产额(虚点线所示)，得出预期值与实验值符合很好.

在分析晶体中孪生无序时，退道的大小与孪生区域的体积和孪晶晶格取向有关. 由于体缺陷退道因子代表单位体积缺陷的退道截面积(表 6.3-1)，因此退道因子是

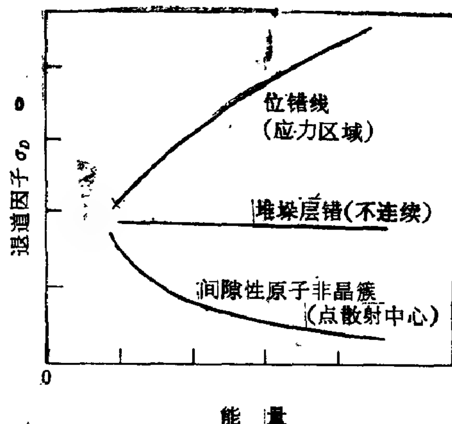


图 6.3-31 不同类型缺陷退道因子与入射粒子能量关系示意图

$$\sigma_D = \frac{d\chi}{dz} \tag{6.3-18}$$

等于孪晶内特定晶相方向每单位深度内随机部分的变化．排列很好的孪晶的退道因子与入射粒子能量的关系很弱．如果孪晶的取向有分散，那么退道因子的能量关系就很强了．在孪晶中表面的贡献类似于层错，一般同体贡献比较起来很小，予以略去．但当孪晶区域厚度减薄，趋于层错结构，于是从内表面退道贡献就重要起来，必须包括进去．

其外，还有空隙和气泡等缺陷类型．空隙可以看成晶体内一部分体积挖掉了．在这个区域，沟道粒子部分地失去了它同原子列或平面的空间关联．因此，当粒子再进入晶体时，新的内表面可能对退道作贡献，其作用类似于堆垛层错[方程(6.3-17)]．随着空隙的直径趋于零．每个空隙产生的退道也趋于零．另外空隙周围晶格原子变形也会引起退道．因此，退道大小主要依赖于空隙的总截面．

气泡常常是材料受到 He 或其它气体轰击时形成的．He 气泡引起的退道与空隙类似，而与泡中气体原子散射的几率是很小的．

由此看来，缺陷退道因子与缺陷沟道参数(不同类型的缺陷具

有不同的沟道参数)有着非常不同的依赖关系（表 6.3-1）. 例如，图 6.3-31 示出位错、堆垛层错和间隙原子等不同类型缺陷退道因子同入射粒子能量的关系. 无疑，这种函数关系增加了研究缺陷类型的灵敏度. 然而，如果有两种以上的缺陷都对退道作贡献，就很难定量地把缺陷分开. 在缺陷研究中，电子显微镜用来确定缺陷的微观特性，沟道测量则用来确定缺陷的数目及其深度剖面.

§6.4 表面和界面的研究

现代固体物理的前沿领域之一是研究材料的表面特性. 材料几埃厚的表面层性质可以和本体差别很大. 从技术上讲，许多新材料的制备过程，如薄膜的外延生长或多相催化剂的形成均与衬底的表面结构关系极大. 而且，表面结构和键接几何的精密确定会对表面理论模型，诸如表面晶格动力学和表面弛豫提供关键性的检验. 低能粒子加速器和超高真空技术的组合使离子沟道背散射技术成为研究表面物理的强有力工具. 它确定表面原子位置的精度可达 ~0.1Å.

一 离子同表面原子的作用

所谓固体表面，严格地说是指真空和固体界面. 即真空不与

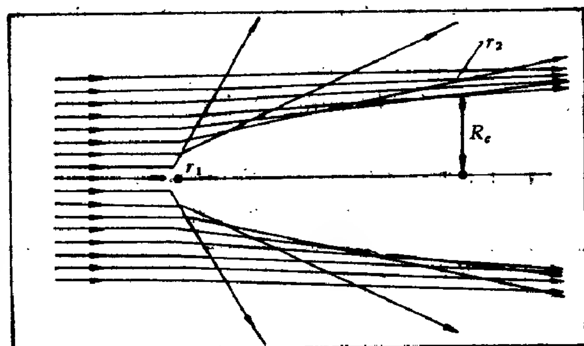


图 6.4-1 平行离子束自静止原子列卢瑟福散射轨迹. 自第一个原子列的散射形成影锥. R_c 是在第二个原子位置的影锥的半径

固体发生作用，表面层的重构只是由于晶体在表面的中止．由上一章可知，在沟道条件下，一定能量均匀分布的离子束平行入射到晶体上，大多数离子同表面原子经历着小角散射，离原子列(或原子平面)距离愈远，偏转愈小．随着碰撞参数的减小，散射角增加．这种散射过程的纯效应是只有原子列的第一个原子对背散射作贡献，其余原子则在第一个原子散射所形成的影锥之内，如图6.4-1所示．假定入射粒子与原子列的第一个原子的距离是 r_1 (即第二章所说的碰撞参数)，到达第二个原子位置时同晶格原子列的距离是 r_2，于是

$$r_2 = r_1 + \frac{Z_1Z_2e^2d}{Er_1} \tag{6.4-1}$$

求 r_2 的最小值 $r_{2\min}$ 可用 $\frac{dr_2}{dr_1}=0$，得到第二个原子处的影锥半径

$$r_{2\min} = R_c = 2\sqrt{\frac{Z_1Z_2e^2d}{E}} \tag{6.4-2}$$

式中 d 是原子列上的原子间隔，E 是入射粒子的能量．在影锥内的原子都受到荫蔽．因而原子列上的第一个原子看到碰撞参数是均匀分布，第二个原子只能看到那些大于影锥半径 R_c 的碰撞参数．对于1兆电子伏 ^{4}He 离子入射到钨上，晶格参数是 $d=3.16$ Å，则 $R_c=0.16$ Å．R_c 值的数量级大于核大小，因此，在完美的静止晶格中，最外层原子确实使后面的原子同束流不能直接发生核碰撞．表6.4-1给出一些晶体的 R_c 值．

在实际晶体中原子是振动的，荫蔽的程度依赖于热振动振幅

表6.4-1　1.0兆电子伏He离子同Si, Ni和W⟨001⟩方向表面散射的临界参数

	d(Å)	u(Å)	R_c(Å)	R_M(Å)
Si⟨001⟩	5.43	0.172	0.094	0.089
Ni⟨001⟩	3.52	0.142	0.106	0.099
W⟨001⟩	3.16	0.107	0.164	0.119

对影锥半径的相对大小．垂直于束流的二维均方振幅 ρ_2 依赖于温度，其范围对大多数常用晶体是 0.05—0.2Å，因此，与影锥半径差不多量级．入射束同原子列第二个原子的近碰几率是荫蔽程度的量度，而且依赖于比值 ρ_2/R_c．在室温下 1.0 兆电子伏 ^{4}He 离子入射到钨晶上的 ρ_2/R_c 值是 0.39，硅的 ρ_2/R_c 值是 1.13．表明在钨中第二个原子是被荫蔽得很好的，同离子束的相互作用很小，但在硅中第二个原子同束流的作用还很强．

定量估计入射束同第二个原子近碰几率 P_2 由通量分布 $F(r)$ 和第二个原子相对于第一个原子位置分布的卷积给出[27]．在库仑近似下第二个原子处的通量分布是

$$F(r)=\begin{cases}0, & r<R_c\\ 1+\dfrac{R_c^2}{2}\dfrac{\delta(r-R_c)}{r}, & r\geqslant R_c\end{cases}\qquad(6.4\text{-}3)$$

这说明影锥内没有粒子，$\dfrac{R_c^2}{2}$ 提供合适的归一因子．原子的位置分布是受热运动控制的，根据 (5.1-31) 式取高斯分布

$$P_s(r)=\frac{1}{\pi\rho_2^2}e^{-r^2/\rho_2^2}\qquad(6.4\text{-}4)$$

因此，第二个原子对散射产额的贡献是

$$\begin{aligned}P_2&=\int_0^\infty F(r)P_s(r)2\pi r\,dr\\&=e^{-R_c^2/\rho_2^2}\left(1+\frac{R_c^2}{2\rho_2^2}\right)\end{aligned}\qquad(6.4\text{-}5)$$

由于考虑原子 1 对原子 2 的相对位移，所以式中多了一个因数 2．上式说明在“两原子近似”下，任何系统近碰的贡献是一个参数 ρ_2/R_c 的函数．这些假定不很精确，因为它没有考虑屏蔽的库仑作用 [(5.1-3) 和 (5.1-4) 式]．当采用莫勒尔相互作用势 (5.1-3) 式时可推出莫勒尔影锥半径 R_M (见表 6.4-1)．虽然莫勒尔影锥半径的值比较精确，但大多数情况下仍采用 R_c 作近似使用．当 R_c/a 小于 2 时 $R_M/R_c\gtrsim 0.8$．

实际情况是表面峰产额对应着更多原子的贡献，必须采用计

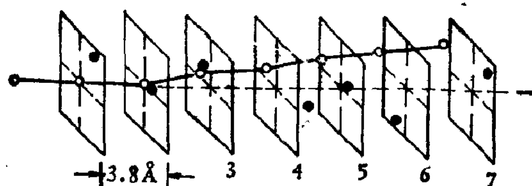


图 6.4-2　在近碰几率的计算机模拟中用到的两体碰撞事件的序列．圆圈○为入射粒子的路径．黑点●是晶格原子的位置．晶格原子的平衡位置是虚线的交点

算机模拟，于是不可能给出简单的分析形式．离子散射的计算机模拟最早是巴锐托（Barret）的工作[28]，其基本思想是把许多二体散射事件汇集起来（如图 6.4-2 所示）．用蒙特-卡罗计算方法处理相应于特定势散射独立的两体碰撞事件，相互作用势为莫雷尔势[(5.3-3)式]，原子的振动看作是相对于平衡位置的高斯分布[(6.4-4)式]．图 6.4-3 是计算机模拟计算得到的在每个原子位置垂直于原子列的通量分布．垂直坐标表示通量的相对大小．水平坐标是至平衡位置的距离(以 ρ_2 为单位)．第一个原子看到入射粒子

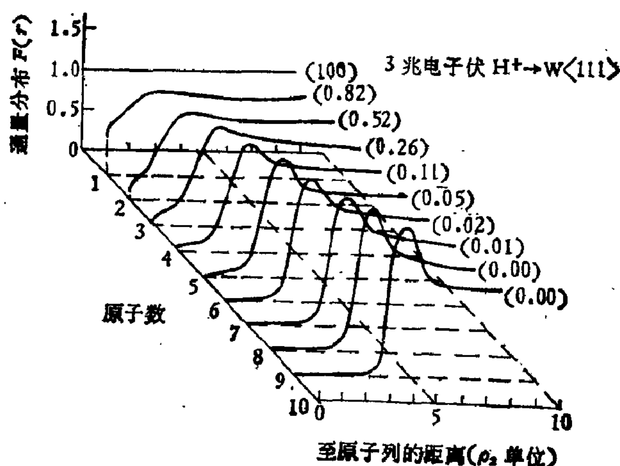


图 6.4-3　3.0 兆电子伏 H^+ 室温下沿 W⟨111⟩ 方向的通量分布的变化．水平坐标以均方热振动振幅 ρ_2 为单位．垂直方向表示每个原子位置通量的相对大小[29]．右边括号中的数据为每个原子的近碰几率

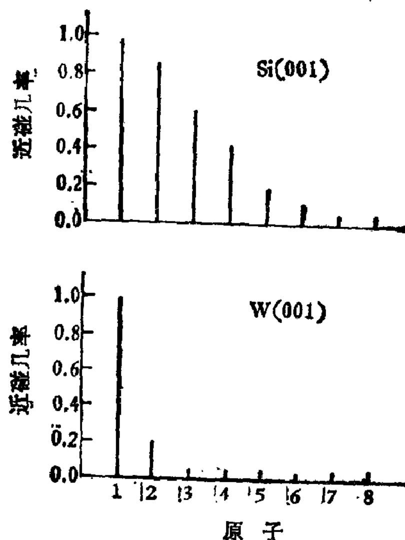


图 6.4-4 1.0 兆电子伏 He 入射到 Si 和 W<001> 方向的近碰几率．单个原子几率取和是 Si-3.3 原子列；W-1.2 原子列

束是均匀分布，而下一个原子则受到部分荫蔽，所以，图中看出在平衡位置附近依次得到较低的通量分布值，当到达第九个原子位置时，近碰几率几乎为零了．所有这些贡献之和就得到总的近碰几率 P_{ce}

$$P_{ce}=\sum_{i,n}\int F_n(r)P_{sn}(r)2\pi r dr \qquad (6.4\text{-}6)$$

计算机模拟的特点是，为了模拟位移原子的散射产额可从这个方程出发改变任何原子的平衡位置和几率分布．在处理重构表面时常常考虑前一两个原子的变化．

图 6.4-4 示出钨和硅中每个原子独立的近碰几率，可以看出钨中只有最外层原子近碰几率大，而硅中则有好几个原子都作贡献．Si〈110〉的总贡献是 3.3．图 6.4-4 表明这个取和包含着近似 6 个原子的贡献．图 6.4-5 是理想晶体表面计算机模拟得到的 P_{c_e} 值(单位是原子/原子列)同 ρ_2/R_M 关系．散射参数是 R_M，热运

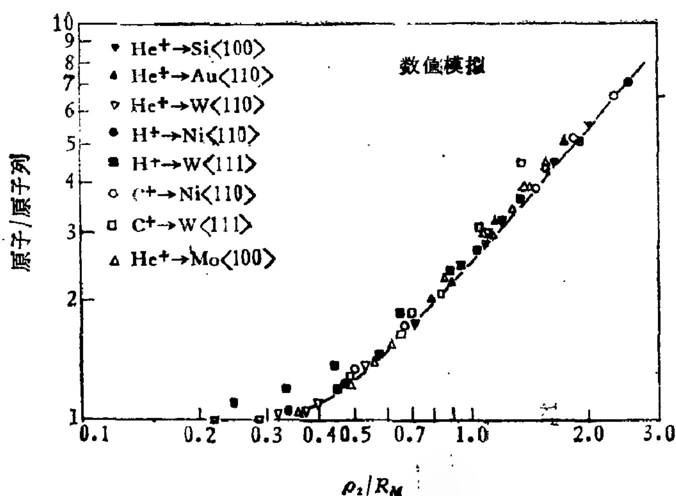


图 6.4-5 用有效原子数(原子/原子列)表示的近碰几率的计算值[29]. 通用曲线是拟合的结果

动的量是 ρ_2. 图 6.4-5 说明这个简单的参数就能很好地描述"通用"曲线. 利用这个"通用"曲线估计表面峰值, 在 $\rho_2/R_M < 0.35$ 时只有最外层原子同束流作用并对近碰过程作贡献, 当 $\rho_2/R_M < 0.8$ 时主要贡献是前两个原子, 而当 $\rho_2/R_M > 0.8$ 时对近碰产额的贡献就是两个以上的原子. 值得注意的是对 $\rho_2/R_M > 0.6$ 的情况, 曲线呈线性关系, 从而可用散射参数或振动振幅来外推表面峰的强度.

图 6.4-6 是一系列不同表面的近碰几率的实验测量[30]. 低能电子衍射观测得到这些表面是"本体类"表面. 因此, 可把计算的"通用"曲线与实验加以比较. 这些"本体类"表面的实验值与理论曲线很接近.

根据方程 (6.4-6) 式可用计算机模拟来计算不同原子位置近碰几率的变化. 在表面研究中最感兴趣的是计算近碰几率同第一个原子位移的关系. 随着位移的增加并超过了影锥, 第二个原子就暴露出来了. 图 6.4-7 示出在 1.0 兆电子伏 He 入射到 W(001) 面的情况下 P_{ce} 的差同位移的关系. 垂直坐标是近碰几率位移值

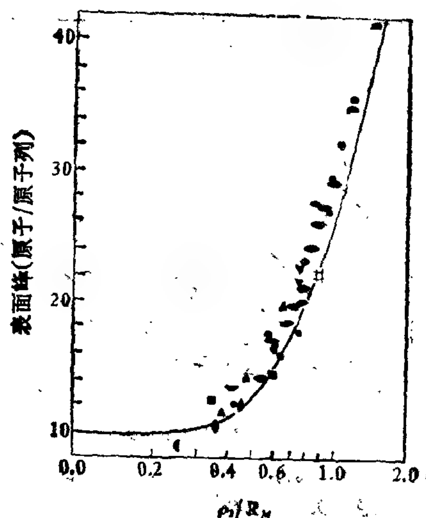


图 6.4-6 一组"本体类"表面的"通用"曲线与实验值的比较．实验值是从背散射测量得到的．标记 $P_t(111)$-⟨116⟩ 表示具有 (111) 表面的 P_t 晶，测量方向为 ⟨116⟩ 轴向[50]

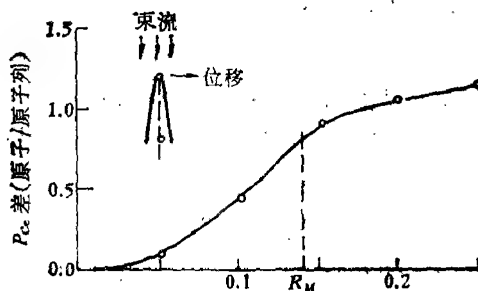


图 6.4-7 位移情况和理想原子列近碰几率 P_{ce} 之差同表面原子相对原子列位移的关系 [1.0 兆电子伏 He 沿 ⟨001⟩ 轴向入射到 W(001) 面上]

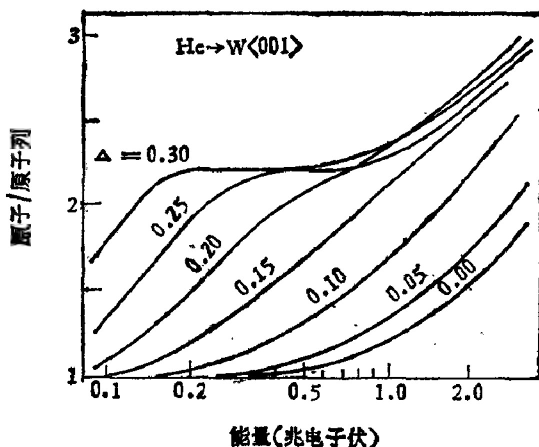


图 6.4-8 He^+ 沿 W〈001〉入射得到 P_{ce} 的能量曲线同第一个原子位移的关系. 位移的单位用Å表示[31]

和非位移值之差. 当位移大于 R_M 时,预计这个差为 ~1 原子/原子列. 在静止晶格中曲线是尖角的步进函数; 在一定振动的晶格中曲线被展宽,其宽度相当于 ρ_2.

为了测量位移, 就要测量 P_{ce} 同能量的关系, 以改变 R_M, 增加测量位移的灵敏度. 图 6.4-8 是不同位移时 P_{ce} 计算值与能量的函数关系. 这种曲线在设计实验获取表面原子位移信息时是有用的.

二 晶体的表面结构和表面峰

晶体表面结构可以许多方式与基体的结构不同, 如图 6.4-9 给出最简单的立方晶格情况下的几种不同的表面结构及定向背散射谱. 图 6.4-9(a)是理想晶体表面,其结构与基体相同,称之谓"基体类"结构. 表面原子对近碰几率的贡献由"通用"曲线 (图 6.4-5 和图 6.4-6) 描述,即在 $\rho_2/R_M < 0.35$ 时每条原子列上约有一个原子经历近碰过程. 图 6.4-9(b) 是一个重构表面, 所谓重构是指原子在晶体表面的平面内发生位移. 如果平行于表面的位移 $\geqslant R_M$, 有两个原子/原子列对 P_{ce} 作贡献. 实际上, 由于 R_M 与能量有关,

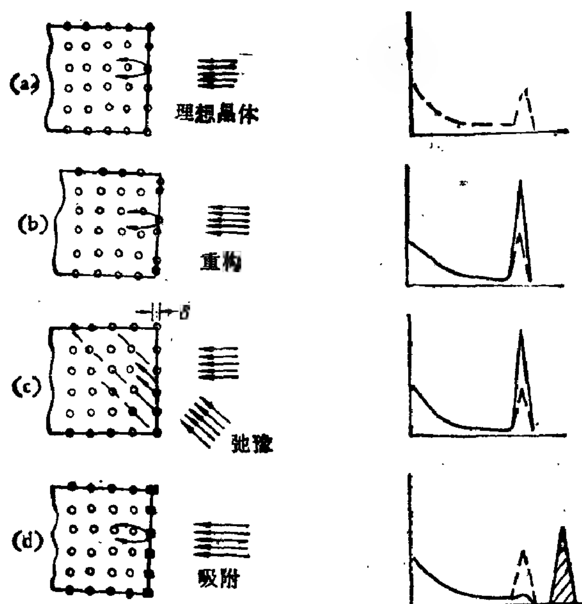


图 6.4-9　立方单晶各种表面结构及其对应的沟道背散射谱

那么 P_{α} 的能量关联会提供原子位移大小的信息.

图 6.4-9(c) 的“弛豫”表面表示第一个原子间距同基体的原子间距是不同的，其差为 δ. 在用沟道背散射考察表面“弛豫”时，一方面要把束流作垂直于表面方向入射，还要把束流对准其它主晶格方向入射. 垂直入射看到每个原子列是一个原子，而非垂直方向入射看到不只一个原子/原子列.

弛豫和重构既可以发生在清洁晶体的表面，也可以发生在有吸收体覆盖的表面. 图 6.4-9(d) 给出表面吸附的例子，不过它是一种理想情况，即吸附原子正好对准衬底的表面原子. 如果吸附物-衬底系统的 $\rho_2/R_M < 0.35$，吸附体则会荫蔽后面的晶体，因而在定向背散射谱中看不到衬底的表面峰信号.

图 6.4-9 的右边给出了上述四种表面结构的表面峰能谱. 虚线代表理想晶体表面的散射产额，其中热振动振幅 ρ_2 远小于影锥半径，保证了表面峰强度对应于一个原子/原子列. 在重构表面的背散射谱[图 6.4-9(b)]中，第二个原子未被荫蔽，因而表面峰的强

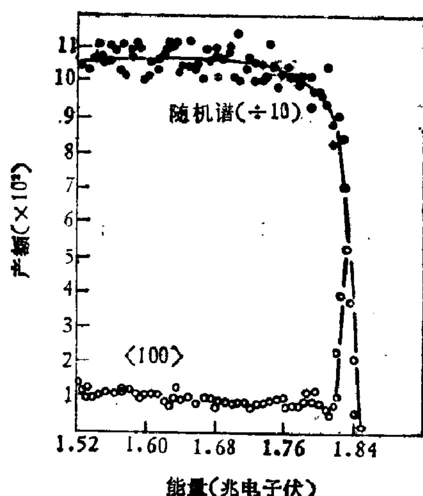


图 6.4-10 2.0 兆电子伏 He 入射到清洁 W(001) 表面，沿〈100〉轴向的定向谱(○)和随机谱(●). 随机谱的计数为原计数的十分之一[27]

度是理想晶体的两倍. 对于"弛豫"表面，必须利用非垂直入射，以便表面原子所建立的影锥不同本体原子列成一直线. 于是，垂直入射方向给出表面峰强度和单原子层的强度相同，斜入射方向则不是，两者之差就可看出表面存在"弛豫". 第四种情况下，如果 $R_{吸附} > \rho_{2衬底}$，表面的吸附原子就可以荫蔽掉衬底原子. 离子散射对原子质量的灵敏度(见 § 3.2) 可以完全区分出衬底和吸附体. 在图 6.4-9(d) 中吸附原子的位置正好在表面原子上，因此使衬底的表面峰减弱了.

图 6.4-10 示出入射束沿 W〈100〉轴的沟道方向和随机方向的背散射能谱. 可清楚地看出表面峰，它相当于 2 个原子/原子列 ($\rho_2/R_M = 0.65$).

三 表面重构

所谓表面重构 [图 6.4-9(b)] 是表面原子在表面内发生横向移动. 它可用背散射实验几何安排 (图 6.1-2) 测量表面峰强度的变化来得到. 受到束流照射的表面原子数目直接由表面峰的强度

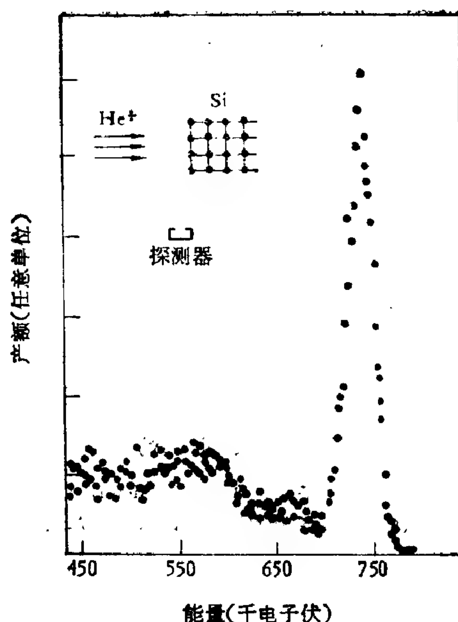


图 6.4-11 1.0 兆电子伏 He^+ 自清洁的 Si(001) 表面的背散射能谱. 探测器放在掠角位置以增强深度分辨率[32]

确定的，如图 6.4-11 的数据所示. Si(001) 表面的几何排列有四个原子层受到垂直于"本体型"表面入射束的照射. 当入射束沿〈001〉轴向入射时，表面峰强度与入射束能量的关系由图 6.4-12 给出. 其中实的曲线是假定表面结构为"本体型"结构计算得到的，即是说，表面原子排列与"本体"完全一样，没有重构. 实验数据和计算曲线("本体型"表面)之差就是位移原子的数目(即，位移原子数/原子列). 在这类实验中位移的灵敏度取决于影锥的大小(图 6.4-7). 能量变化改变影锥大小(图 6.4-8)，从而提供位移变化的信息. 例如，在图 6.4-12 中，实验和计算之差表明在 1 兆电子伏入射时为 1 个原子/原子列 ($R_c \simeq 0.09$ Å) 或称 4 个单原子层；而在 0.1 兆电子伏 ($R_c \simeq 0.2$ Å) 入射时为 ~0.5 原子/原子列(即为 2 个单原子层). 这表明有 4 层原子移动距离大于 0.09 Å，其中有约 2 层原子位移大于 0.2 Å.

图 6.4-13 还给出不同能量的 H 和 He 在各种不同的晶格方向

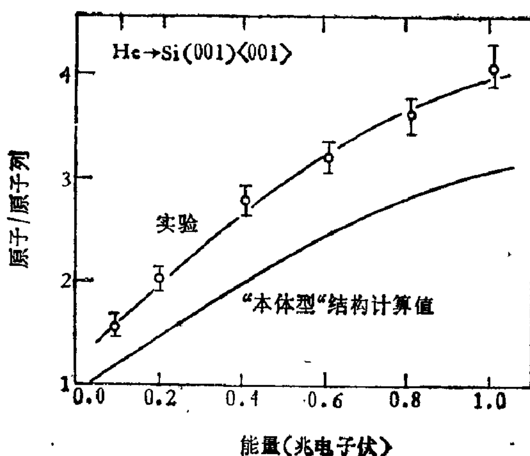


图 6.4-12 室温下 He 离子入射到清洁的 Si(001) 表面测得表面峰强度同能量的关系．实线是"本体型"表面计算的结果[33]

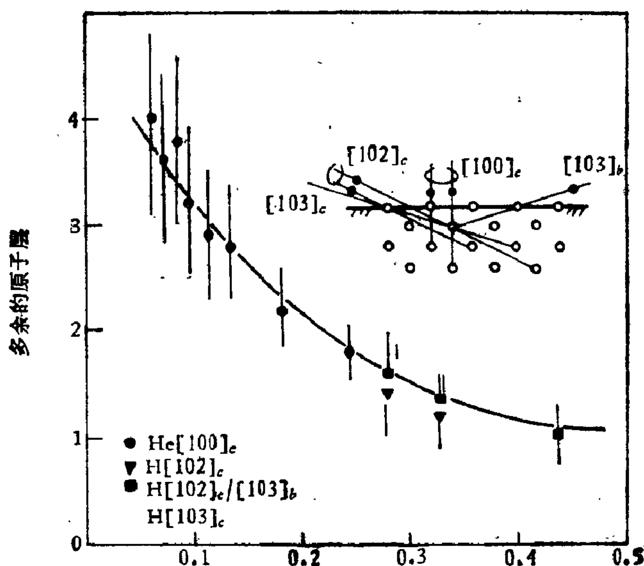


图 6.4-13 不同能量的 H 和 He 在各种晶格方向上入射到 Si(001) 本体型表面得到表面峰强度实验与理论之差同影锥半径的关系[34]．插图给出不同入射方向：c 是沟道方向；b 为阻塞的出射方向

上入射到 Si(001) 本体型表面上得到实验和计算之差。 在这个图中水平坐标是影锥半径。当影锥半径大时图中的实验数据逐渐拉平了，表明单原子层具有大的位移（>0.45 Å），这同成对模型的图象相符合。而在影锥半径比较小时增加较大，说明在重构的半导体表面中存在着小的次表面位移。

四 表面弛豫

表面弛豫是指固体表面头两层之间的间距发生变化，如图 6.4-9(c) 所示。离子散射技术测量表面弛豫是直截了当的。可以象图 6.4-9(c) 那样在非垂直方向测量表面峰的强度。从非垂直方

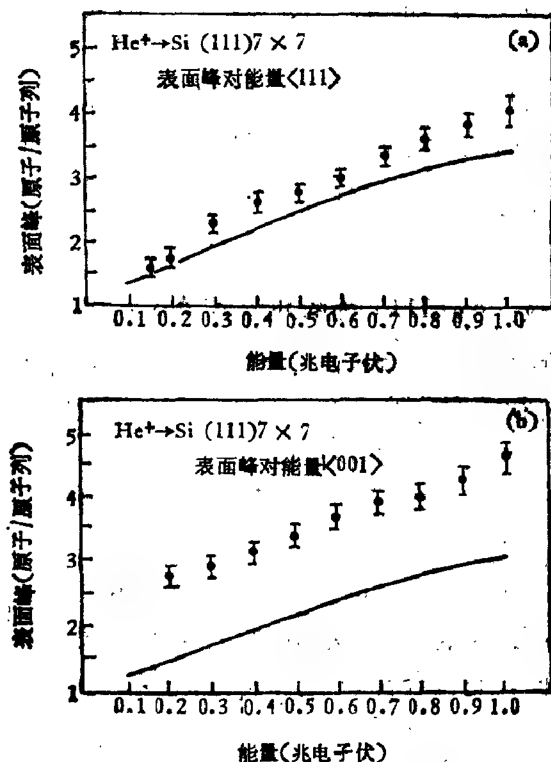


图 6.4-14 Si(111) 面在室温下背散射表面峰强度同入射粒子能量的关系：(a) 沿垂直于表面的〈111〉方向入射；(b) 非垂直的〈001〉方向入射。曲线是计算机对"本体型"表面模拟的结果[36]

向看去，如果弛豫的大小使得第一层原子超过了影锥半径，则表面峰强度比理想晶体的表面峰强度增加．正如在表面重构的情况中那样，这种方法很容易测量到离本体晶格位置移动 0.1 Å．表面弛豫常用偏离本体晶格间距的百分比来表示．0.1 Å 相当于 3%．最低可以达到 0.01 Å[35]．这种比较新的表面弛豫的探测方法，目前还只应用于少数贵金属或接近贵金属，例如：Au、Pt、Ag 等．

图 6.4-14 示出清洁的 Si(111) 面有大的垂直位移，即垂直于表面的位移．其结果与 7 × 7 低能电子衍射（LEED）的图案吻合[36]．图 6.4-14(a) 为垂直于表面入射时的〈111〉轴向．图 6.4-14(b) 是非垂直入射方向的〈001〉轴．实线是计算机模拟"本体型"表面结构的结果．可以看出，在垂直入射(即〈111〉方向)时，测量结果同"本体型"表面的计算结果符合很好；而在非垂直入射的〈001〉方向时，差别很大，约大于 1 个原子/原子列或两个原子层．通过对不同表面模型的计算机模拟，得到了表面头两个原子层之间移位了～0.4 Å．这种表面原子位移是垂直位移，而前面所说的表面重构中，是在 Si(001) 2 × 2 表面内的重新排列．

五　衬底荫蔽：Ag(111) 面的外延层 Au

沟道背散射的一个重要应用是研究外延的初始阶段．图 6.4-9(d) 所示的情况可看出它能检测从第一个单层开始的外延生长．如果这些沉积的原子正好对准衬底的原子 [图 6.4-9 (d) 所示]，(称之为完全对准)，那么这些吸附原子能屏蔽掉衬底表面原子而不受入射束的作用．

图 6.4-15 是在 Ag(111) 面上沉积覆盖单原子层的 Au 所起到的屏蔽作用．图的左上角示出 (111) 表面的横截面，图的平面是 (011) 平面，它包含着〈111〉的垂直方向和〈011〉的非垂直方向．在〈111〉方向上，离子束看到头三层未覆盖的 Ag 表面；而在〈011〉方向上只能看到第一个单层．图 6.4-15 示出 1.0 兆电子伏 ^{4}He 沿〈011〉方向入射到清洁 Ag 表面以及表面覆盖一层、三层和四层 Au 的背散射谱．对于覆盖的表面，Ag 的表面峰随覆盖层增

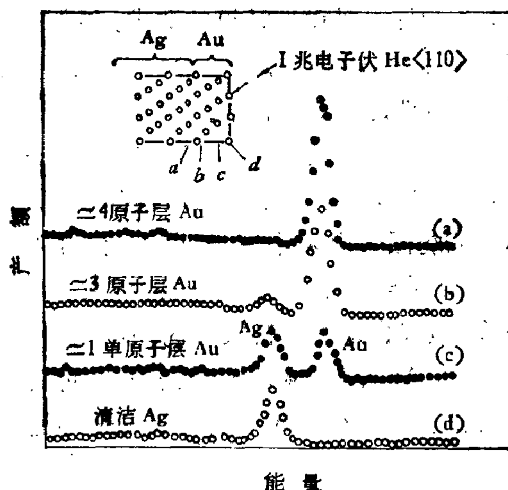


图 6.4-15　1.0 兆电子伏 ^{4}He 沿〈011〉方向入射到清洁 Ag 表面 (a) 和 Au 覆盖层的 (b)、(c)、(d) 的背散射谱. 随着 Au 覆盖层增加 Ag 的表面峰减少[37]

加而减少直接证明 Au 层正好座落在衬底的原子列上，也即是说，Au 是取向附生在 Ag 上(即外延生长). 这种一层一层的外延附生法对〈011〉方向最灵敏，因为这时只要一层 Au 就可覆盖所有的 Ag 位置.

图 6.4-16 示出 Ag 表面峰随着 Au 覆盖层增加而减弱的函数关系，覆盖是在低温(140K)下进行的而测量是在〈011〉方向. 实

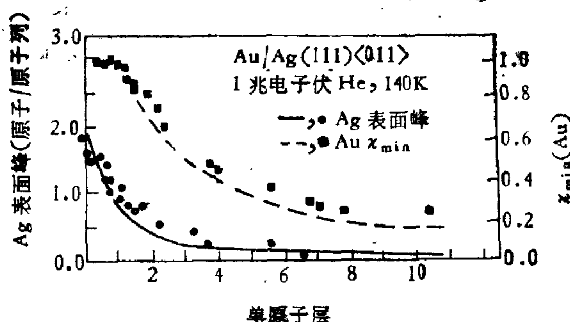


图 6.4-16　Ag 表面峰强度与(111)表面上 Au 覆盖层的关系. 测量方向是 1.0 兆电子伏 He$^+$ 沿 Ag〈110〉方向，温度为 140K 沉积的 Au. 右边还给出定向和随机方向 Au 信号之比同 Au 覆盖层的关系[37]

线是采用图 6.4-2 的计算机模拟计算的结果，显然是假定 Au 原子一层一层均匀地覆盖在 Ag 表面。 实验数据和计算曲线符合很好表明 Au 具有很好地外延和均匀覆盖。

Au 的第一层是否真正覆盖在 Ag 衬底上可以通过 Ag 的表面峰减小来监督，第二层 Au 原子是否正好盖在第一层 Au 原子上可以通过 Au-Au 的荫蔽效应来监测. Au⟨011⟩信号对随机产额之比 χ_{min}(Au) 在一个原子层覆盖处呈现断开的现象，并且在覆盖层高的时候迅速下降. 虚线也是计算机模拟的。两者符合也表明 Au 确实是取向附生的。 Ag 表面峰随 Au 覆盖增加而减少给出外延层对衬底覆盖好坏的度量；χ_{min}(Au) 的减少则是外延层薄膜质量的度量。

上例充分显示了离子散射在研究外延初始段的作用，它特别适于研究超晶格的形成。

六 阻塞方法确定表面吸附原子的位置

确定吸附在晶体表面上杂质原子位置是表面物理的中心问题，在离子散射中可利用荫蔽和阻塞的概念来确定被吸附物质的

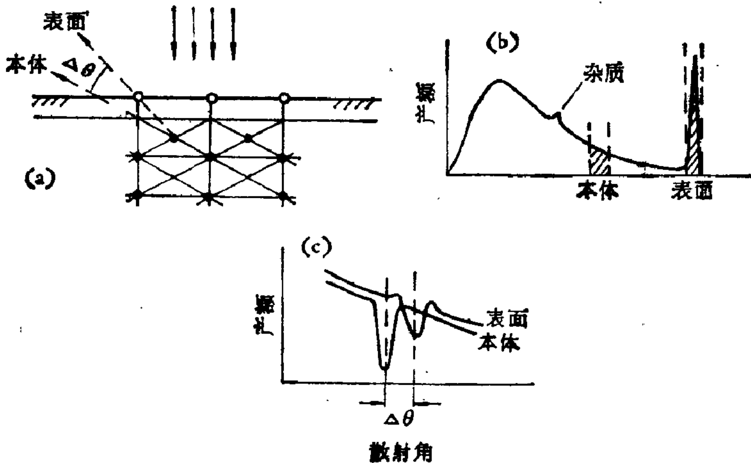


图 6.4-17 散射几何示意图及表面阻塞方法的数据：(a) 入射是沿着垂直于表面的轴向且沿偏离轴方向探测散射粒子. (b) 衬底表面峰以及本体散射和杂质峰的能谱. (c) 从本体和表面单层的背散射粒子角分布

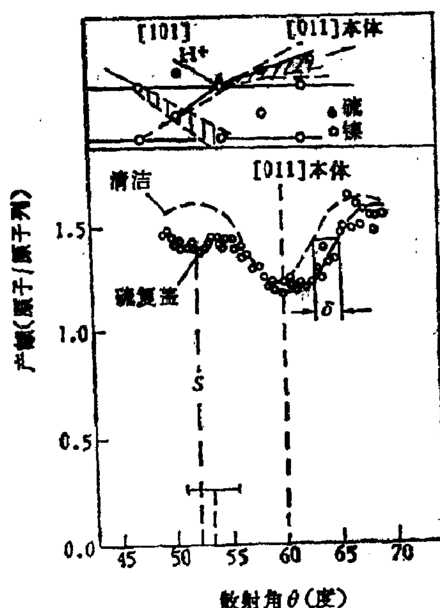


图 6.4-18 H+ 入射到清洁和 0.5 单层硫覆盖 Ni(110) 表面背散射粒子角分布[58]. 上面是从第一单层硫覆盖 Ni(011) 表面背散射粒子的阻塞示意图

位置. 例如,在 Ni(110) 上附着 S, 低能电子衍射观察到 $c(2\times 2)$ 图案.

图 6.4-17 给出基本的散射几何示意图,其中假定硫处在四重坐标位置. $c(2\times 2)$ 低能电子衍射图案建议硫不是在 Ni 原子的上部就是在四重坐标的空位. 入射束沿 [110] 方向. 荫蔽效应保证从表面的背散射主要是由每个原子列的表面原子产生的. 从 Ni 表面原子背散射的粒子在其出射路径上为硫的覆盖层所阻塞(硫原子形成了一个阻塞锥). 然后测量 Ni 表面峰强度与探测器角度的关系,呈现一个极小值; 最小值的角位置决定着硫在 Ni 表面上方的高度. 这种情况下,结构参数是由几何条件确定的,而不需要进行绝对强度的测量.

图 6.4-18 给出硫在 Ni(110) 面上测得的数据. 在这个例子中束流沿 [101] (非垂直)方向入射, 此时 S 原子不会荫蔽 Ni 原

子. 但是，硫原子能在出射方向阻塞散射粒子. 图 6.4-19 中清洁的和硫覆盖 Ni 表面的阻塞角分布呈现出两个特征：第一，在相当于 Ni-Ni 阻塞的 60° 处有较大的下沉，这是衬底原子位置的量度；第二，在对应于 Ni 散射和 S 原子阻塞的 ~53° 处有一极小，它是吸附原子位置的度量. 这种解释已为计算机模拟所证实（图中的实线）. 计算机模拟包括表面结构并且得到每个独立单层阻塞角分布. 注意清洁表面和硫覆盖表面在 ~60° 的下沉存在着位移 δ，表明由于硫吸附 Ni 原子位置发生了移动. 以上分析得到硫吸附在 Ni(110) 上的参数如下：

(i) 硫在 Ni 上方的距离是 (0.87 ± 0.03) Å，这与低能电子衍射的结果一致.

(ii) 在硫覆盖的情况下 Ni 表面扩展了 6%.

这些实验的几何安排在表面结构分析中是特别引人注目的.

七　金属-半导体界面的反应

肖脱基（Schottky）结是一种固体器件，它是在半导体衬底上沉积一个很薄的金属层. 这种器件的二极管或整流特性是由于金属-半导体界面存在位垒. 表面位垒的控制和重复性则是器件设

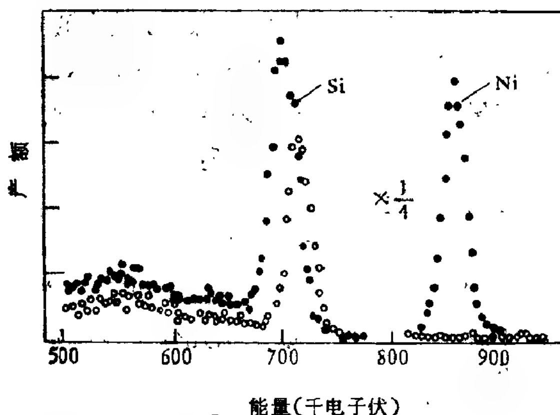


图 6.4-19　1 兆电子伏 He 沿 ⟨111⟩ 方向入射到清洁(○)和 Ni 覆盖(●) Si(111) 表面上在掠角方向得到的背散射谱[39]

计和可靠性的关键问题．然而，理解肖脱基位垒的形成仍然是固体物理中没有解决的问题之一．

最近通过对衬底表面峰的测量证实金属薄层和半导体衬底之间存在反应．图 6.4-19 是纯单晶 Si(111)面和 Ni 沉积到 Si(111) 样品的散射谱．由于 Ni 的沉积，Si 峰的面积有明显的增加，表明非对准 Si 的量增加了．这至少消除了两种可能的固态结构：(i) Ni 层在 Si 原子的上方对准 Si 原子列，如果是这种情况，那么由于荫蔽效应 Si 的表面峰应该减弱．实验证明覆盖后 Si 表面峰增强；(ii) Ni 是一个无源层，因为当 Ni 层是无源层时 Si 表面峰值应和没有 Ni 覆盖的纯 Si 表面峰一样．表面峰的增加表明存在着反应，使 Si 偏离了正常的晶格位置．利用离子散射的这些量可以得到 Si 表面峰增加同 Ni 覆盖程度的关系，如图 6.4-20 所示．在室温沉积下，Si 峰随 Ni 覆盖层单调增加直至饱和．在饱和时，界面层所含的非对准 Si 原子数目增加到 1.1×10^{16} 原子/厘米^{2}厚度约为 ~20 Å．

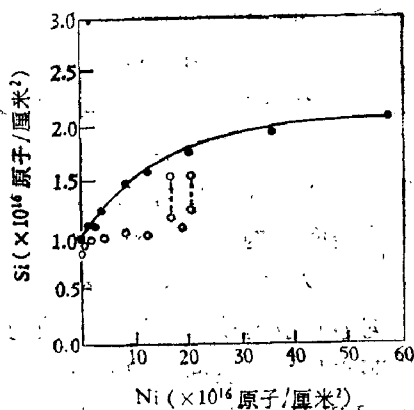


图 6.4-20 Si 界面峰与 Ni 覆盖层的关系．Ni 沉积温度 300K(●) 和 170K(○)．虚线箭头表示温度从 170K 缓慢增加到 300K 时 Si 界面峰的增加[39]

图 6.4-20 还给出 170K 沉积时实验分析结果．这时 Si 峰总增加量同室温沉积相比大大地减少了．显然，在反应中消耗的 Si 量减少了．

这些数据说明：没有 Ni 覆盖时，Si 表面峰 (~9×10^{15}/厘米^2) 接近于理想 Si 晶的值，此时 170K 的值略低于 300K 的值，这是由于热振动振幅随温度变化引起的．在室温和单原子层覆盖(图中圆点)时，Ni 和 Si 之间有化学反应，使得 Si 表面峰增加，Si 原子偏离了它原来的晶格位置．随着 Ni 覆盖的增加，反应继续进行．

但不可能无限制下去，而是受到参加反应元素通过硅酸镍薄层扩散率的限制。因此，在室温沉积下会出现饱和。在低温下 Si 的峰略有增加，表明近似为一个单原子层反应，但反应总额却受到低温下扩散率的减少而小许多。

这些研究表明金属-半导体界面实际上可以看成金属-界面层-半导体结构。表面位垒的高度对界面特性是很灵敏的。

确定固体表面单原子层的排列以及覆盖层同衬底表面的作用是表面科学的中心问题。至今还找不到一种方法能确切地回答所有的表面结构和界面相互作用的问题。近几年来，发展了各种现代实验技术[*]对揭示固态表面结构均作出了自己的贡献。显然，离子沟道和散射技术是这个领域的重要组成部分。上述的一些例子说明它是探测表面结构的灵敏工具。表面峰的变化同低能电子衍射 (LEED) 图案的变化相互关联。不过它与 LEED 图案所提供的信息有些不同，离子散射所提供的是短程的局域原子结构的信息。主要是关于原子位移、位移原子的数目、吸附原子位置，表面和界面反应等方面的定量信息。至于它在离子注入、杂质和缺陷相互作用研究中的应用，我们在后面还会涉及到。

§6.5 原子核寿命的确定

前面已经指出，阻塞效应是沟道效应的倒易过程(图 6.1-9)。沟道效应中，以晶轴方向入射的离子与晶格原子近碰产额大大减少。根据物理学倒易原理，可以预料，如果处于晶格位置的原子向周围发射带电粒子，那么靠近晶轴方向接收到的带正电粒子也应大大减少。用阻塞效应来测量原子核寿命是沟道效应在核物理上最有意义的应用。这个应用的基本原理类似于外来原子定位，它是用阻塞（或沟道）行为在误差为 ~0.1 Å 范围内确定原子核相对于晶格的位置。

---

[*] 部分微探针方法已在第三章和第四章讨论过。

一 阻塞法测量核寿命的原理和方法

用适当的粒子束(快中子、质子等)轰击晶体,激发晶格中的一个原子核,形成"复合核". 如果这个反冲"复合核"紧接着衰变并且发射带正电的粒子(如质子、α 粒子、裂片碎片等), 那么就可以利用这些发射得到的阻塞图案来确定原子核(复合核)在衰变之前走了多远,如图 6.5-1 所示. 那些在晶格位置 ~0.1 Å 距离就衰变的原子核出现一个完全的阻塞坑(图 6.5-1 中的曲线 I), 又叫正常的或瞬发的阻塞坑. 有些复合核寿命比较长,反冲在距离 0.1—0.5 Å 范围内衰变的原子核呈现部分阻塞,叫做缓发阻塞坑,阻塞坑比较浅和窄(图 6.5-1 中的曲线 II 所示). 如果复合核寿命更长, 在更长的反冲距离(如~0.7 Å 或更远)处才衰变, 这时衰变原子核发射粒子的探测基本上是各向同性的. 由于反冲速度通常是在 10^7—10^9 厘米/秒的范围,反冲 0.1 Å 距离所用的时间是 10^{-16}—10^{-18} 秒. 在观察不垂直于反冲方向的晶轴的阻塞效应时这个时间数量级还可以扩大 2—3 倍,因为只有垂直于阻塞轴的速度分量 $v_\perp$ 会减少

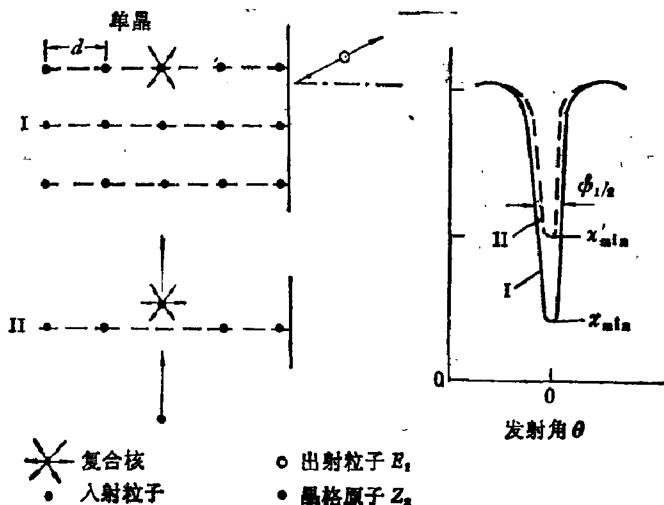


图 6.5-1 从单晶中发射带电粒子角分布示意图: (I) 从晶格位置发射的; (II) 由入射粒子和晶格原子核作用生成复合核行走一段距离发射的. 发射角 $\psi=0$ 是平行于晶格原子列的

阻塞坑的强度. 可见,这种方法测量核寿命的原理是比较简单的.

然而,定量求核寿命还是相当复杂的,需要仔细地寻找阻塞坑同下列因素的关系: (i) 中间区域(0.1—0.7 Å),即部分阻塞所发生的反冲距离; (ii) 从发射发生处到晶体表面的距离(即深度). 因此,一般只能粗略地估计寿命.

实验测得部分阻塞坑(缓发)的最小产额 $\chi'_{\min}$ 和完全阻塞坑(瞬时发射)的最小产额(图 6.5-1)之差与核寿命 τ 之间有如下关系[40]:

$$\begin{aligned}\Delta\chi_{\min} &= \chi'_{\min} - \chi_{\min} \\ &= \frac{2Cv_\perp^2\tau^2}{r_0^2}\left\{1 - \left(1 + \frac{r_c}{v_\perp\tau}\right)\exp\left(-\frac{r_c}{v_\perp\tau}\right)\right. \\ &\qquad \left. - \frac{1}{2}\left(\frac{r_c}{v_\perp\tau}\right)^2\exp\left(-\frac{r_c}{v_\perp\tau}\right)\right\} + \exp\left(-\frac{r_c}{v_\perp\tau}\right)\end{aligned} \tag{6.5-1}$$

其中常数 $C = 1.3\pm0.2$, r_0^2 可由单位晶胞横截面积的(5.1-21)式给出,即 $r_0^2 = \frac{1}{\pi Nd}$, N 为原子密度, d 是沿原子列的原子间距, r_0 为每个原子列所占据圆柱形的有效半径. r_c 为原子势的截断距离,其物理意义是当复合核在垂直晶轴方向位移 $r < r_c$ 处衰变,则向晶轴方向发射的带电粒子因受晶轴原子势的作用要受到阻塞; 当 $r > r_c$ 时,向晶轴方向发射的带电粒子不再受其影响, $r_c = (\pi Nd)^{-\frac{1}{2}}$[41]. 式(6.5-1)中的第一项为截断距离前的衰变事件对阻塞坑极小值的贡献,第二项是截断距离后的衰变事件对阻塞坑极小值的贡献.当复合核寿命较长,在截断距离前的衰变几率很小时,(6.5-1)式可进一步简化为

$$\Delta\chi_{\min} = \chi'_{\min} - \chi_{\min} \approx e^{r_c/v_\perp\tau} \tag{6.5-2}$$

原则上说,根据阻塞坑的深浅,由(6.5-1)式或(6.5-2)式即可确定寿命了. 但是,当实验上测得了 $\chi'_{\min}$ 时,要在相同条件下得到 $\chi_{\min}$ 是不容易的. 因此,常常采用弹性散射阻塞坑作为零寿命的阻塞坑. 更为合适的方法是采用同时测量与束流成不同角度(θ_1,

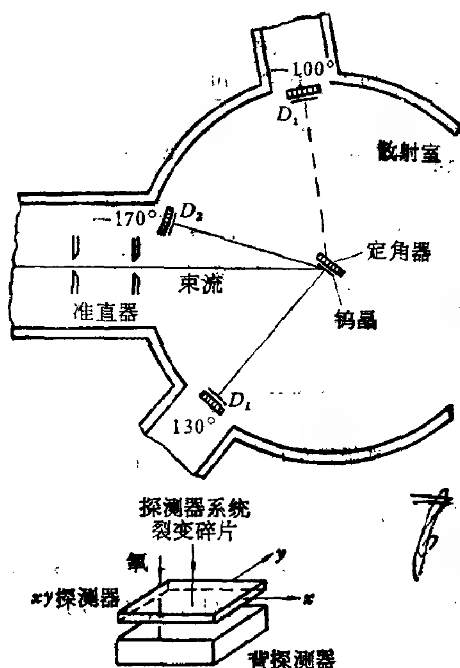


图 6.5-2 阻塞法测量核寿命的实验装置示意图. 探测器放在离晶体～105 毫米远. 下方为探测器系统，包含一个位置灵敏的前探测器和一个后探测器，晶体的方位相应于绕⟨111⟩轴向测量阻塞角分布，相对于束流是 130° 位置

θ_2）的两个相同指数的阻塞坑．例如，对立方晶体而言，⟨110⟩、⟨011⟩就是相同指数的晶轴，由于它们具有良好的对称性，又是同时测量的，因而多次散射、晶格热振动等对阻塞坑贡献相同，可利用 $\Delta\chi_{min}=\chi_{min}(v\tau\sin\theta_1)-\chi_{min}(v\tau\sin\theta_2)$ 求得 τ 值，即[42]

$$\Delta\chi_{min}=2CNd\pi v^2\tau^2(\sin^2\theta_1-\sin^2\theta_2) \tag{6.5-3}$$

这里，v 表示反冲速度，τ 是寿命．这种方法不仅消除了热振动对最小产额的影响，而且大大减小退道、晶格不完整性（缺陷）对最小产额的贡献．

图 6.5-2 给出实验装置示意图．从加速器来的离子束经准直后进入靶室，在靶上得到直径 ≲0.5 毫米的束斑．靶和探测器之间的距离是 ≳150 毫米，以便在各种倾角下阻塞图案获得好的空

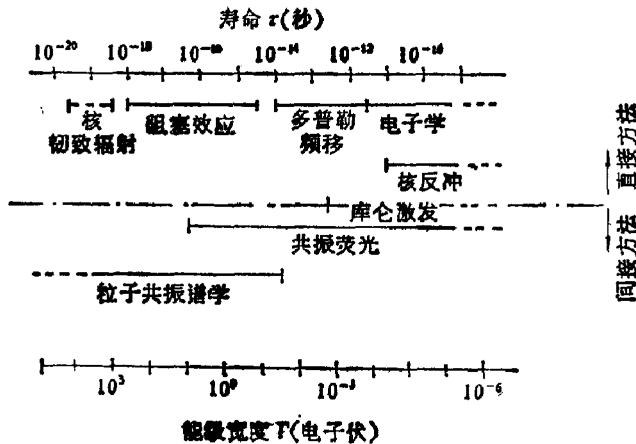


图 6.5-3 测量寿命的各种方法：直接的和间接的测量

间分辨率．单晶装在二维定角器（图 6.1-1）上，使其能平移而保持晶体方位、束斑大小和位置（相对于探测器）保持不变．靶的架托上围着金属遮板，使得在液氮冷却时不会引起表面污染．晶体冷却可通过接触于样品架后部的铜刷．靶室和遮板设计要使探测器系统能放在四个预定角度的位置，即，$-100°$，$+130°$ 和 160—170°．因此，当需要沿相同对称轴方向（如〈111〉或〈100〉）同时记录两个阻塞图案时，一对探测器应放在靶的对向角 70° 或 90° 的位置．

1970 年以来，用上述阻塞方法研究了一系列复合核寿命．例如，利用共振反应 $^{31}P(p,\alpha)$，$^{31}P(p,\gamma)$ 和 $^{28}Si(\alpha,\gamma)$ 得到 ^{32}S 复合核激发态 9.486 兆电子伏的寿命 $(8\pm4)\times10^{-15}$ 秒，相当于能级半宽度 $\Gamma=(8\pm4)$ 电子伏[43]．安德逊等用 1.7、1.8、2.3 和 3.6 兆电子伏的中子轰击单晶 UO_2，研究了复合核 ^{239}U 的裂变寿命[44]．卡马宁等[45,46]用 ^{11}B，^{12}C，^{16}O，^{22}Ne，^{31}P 离子轰击 ^{133}W，^{181}Ta 和 ^{197}Au 单晶靶，得到复合核寿命值在 $(2—7)\times10^{-18}$ 秒，结论是：对于 $79<Z<82$ 的高激发态复合核，其能级密度用费米气体模型描述较好；对 $Z>85$ 用恒温模型较好．阻塞效应也被用来研究非弹性散射复合核寿命，其寿命均为 10^{-17} 秒的数量级．

由于晶格原子热振动振幅最大值 ~0.1 Å，带电粒子核反应中，复合核反冲速度通常在 10^8—10^9 厘米/秒，因而阻塞效应可测量的最短寿命为 10^{-18} 秒；可测量寿命的高端取决于反冲速度、入射束与晶轴的夹角。如果用低能中子核反应，测量寿命范围可达 10^{-14}—10^{-18} 秒。图 6.5-3 为测量原子核寿命的各种方法及其范围[47]。阻塞效应是直接测量 10^{-14}—10^{-18} 秒核寿命的唯一方法。

二 质子和中子引起的裂变寿命

用阻塞效应测量短的核寿命的思想比较早，但是成功的却较晚，原因是很难找到合适的反应。这种核反应发射粒子应是带电粒子，而且生成复合核的寿命要在 10^{-14}—10^{-18} 秒范围之内。

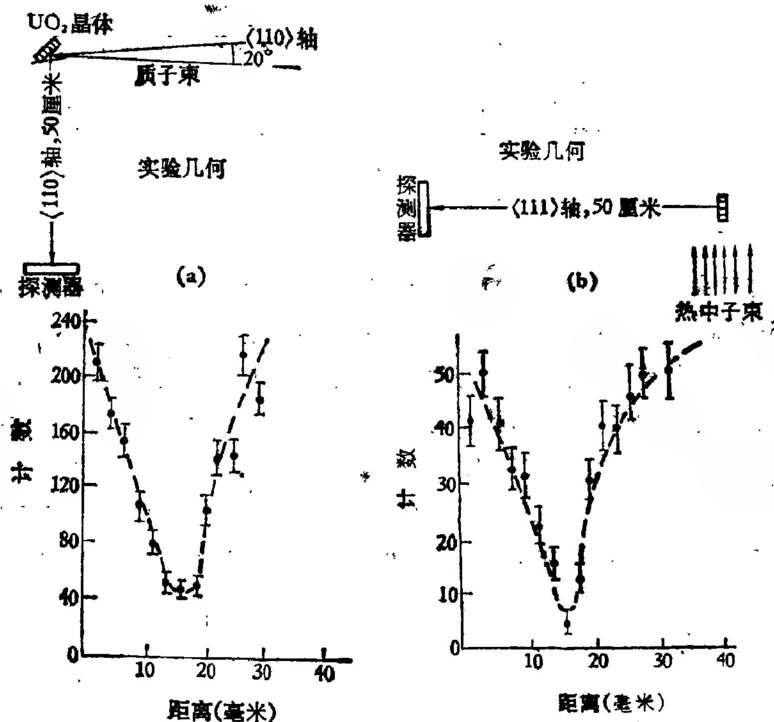


图 6.5-4 单晶 UO_2 沿〈111〉轴裂变碎片角分布：(a) 12 兆电子伏质子感生裂变；(b) 热中子裂变．采用塑料径迹探测器，对晶体的张角为 0.1°，每谱的上方是相应的实验几何安排[48]

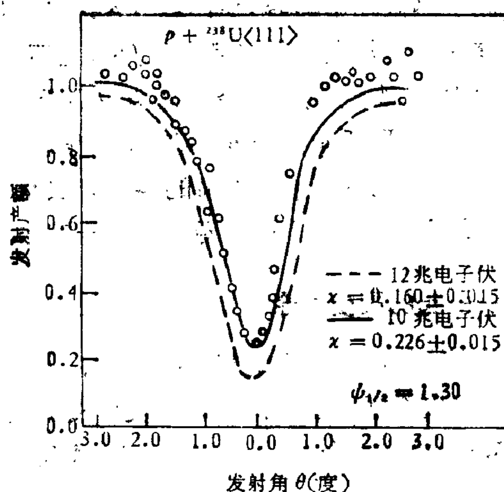


图 6.5-5 测量 10 兆电子伏质子轰击 UO_2 晶体在平行于〈111〉轴方向发射的裂变碎片角分布（实线和点），虚线是 12 兆电子伏和 9 兆电子伏质子进行的. 12 兆电子伏的曲线是三次结果.所以虚线实际为三次 12 兆电子伏和一次 9 兆电子伏的统计平均. 10 兆电子伏的结果是二次实验测量的平均

第一个成功的实验是测量 UO_2 单晶中激发态原子核 ^{239}Np 的裂变寿命[48]. 裂变是由 12 兆电子伏质子轰击 ^{238}U 得到的. 图 6.5-4(a) 的阻塞图案与相同单晶热中子感生 ^{235}U 裂变的谱 [图 6.5-4(b)] 差不多. 不过在热中子感生 ^{235}U 裂变的情况下，反冲速度是可以忽略的. 因此，它可提供完全阻塞效应（χ'_{min}）的标准（注意：这是从裂变发生处到晶体表面距离的平均）. 于是，就可利用方程（6.5-2）推出 12 兆电子伏质子轰击裂变产物寿命 τ 应小于大约 4×10^{-17} 秒. 因为图 6.5-4 中（$\chi'_{min}-\chi_{min}$）不会大于 ~0.03（12 兆电子伏质子轰击产生反冲核 ^{239}Np 速度为 2×10^7 厘米/秒）.

仔细研究质子感生 ^{238}U 裂变及在 10 兆电子伏附近的质子窄能区观察到阻塞效应减弱很小，如图 6.5-5 所示. 并同 9 兆电子伏和 12 兆电子伏能量的结果加以比较. 从两个曲线最小产额之差 $\Delta\chi_{min}$ 来看可以得到有约 7% 的原子核在衰变前反冲超过了

r_c，这样，从方程(6.5-2)得到平均寿命 τ 是 $\sim 6\times10^{-17}$ 秒．解释裂变寿命同质子能量的振荡关系是相当复杂的，可能同"二次裂变"的几率有关，即在裂变前发射快中子．当能量为 9 兆电子伏时，中子发射很少，可以忽略．因此，裂变包含着高激发的原子核，所以寿命很短．当能量为 10 兆电子伏时，已经有足够的能量产生中子发射，于是有相当数量的"第二次机会"发生裂变．这些原子核退激就足以测量到裂变寿命．然而，当能量为 12 兆电子伏或更高时，就是"第二次"裂变的原子核仍具有很高的激发能，所以又包含较多的很短寿命的核碎片．

三　重离子感生裂变

用阻塞效应观察重离子感生裂变寿命，得到高激发态复合核寿命同激发能和复合核质量之间的关系[45]，如表 6.5-1 所示．不同的质量 $(79<Z<82$ 和 $Z>85)$ 可用不同的模型(费米气体和恒温模型)来描述．

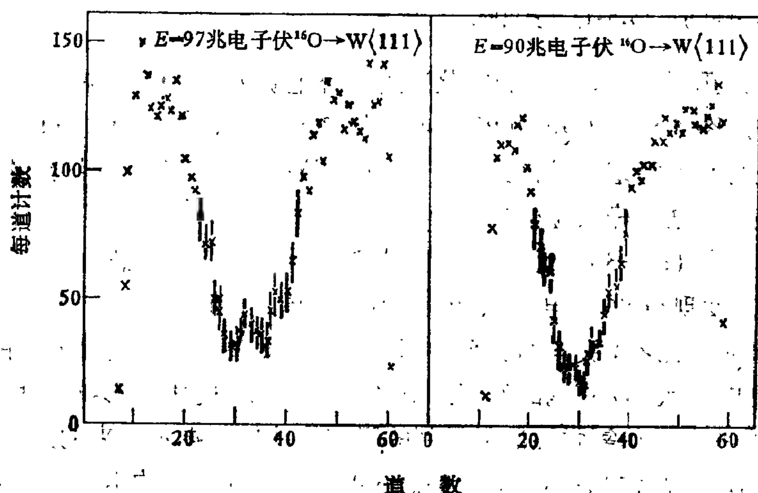


图 6.5-6　90 和 97 兆电子伏 ^{16}O 感生 W 裂变在⟨111⟩方向的阻塞图．90 兆电子伏的数据对应于复合核朝着最近邻⟨111⟩原子列方向反冲；97 兆电子伏相当于反冲方向朝着⟨111⟩沟道的中心，因而在阻塞坑中心出现了一个"通量峰"[42]

表 6.5-1 重离子感生钨和钽裂变最小产额差的实验测量和理论结果[43]

核反应	$E_{离子}$	E^*	$\Delta\chi_{min}$	$\tau_{实验}\times10^{-19}$秒*)		$\tau_{理论}\times10^{-19}$秒	
	(兆电子伏)	(兆电子伏)		$r_c=0.4$ Å	$r_c=0.2$ Å	$a_n=a_c=A/8$	$a_n=a_c=A/4$
$^{186}W(^{11}B, f)$	87	80	0.096±0.014	69	38	0.79	16
$^{186}W(^{12}C, f)$	80	64	0.087±0.015	67	37	1.1	22
$^{186}W(^{12}C, f)$	108	89	0.007±0.015	≤19	≤11	0.29	4.2
$^{181}Ta(^{16}O, f)$	96	63	0.104±0.047	60	32	3.7	130
$^{181}Ta(^{16}O, f)$	137	101	0.004±0.035	≤33	≤18	0.45	8.1
$^{186}W(^{16}O, f)$	97	67	0.083±0.015	52	29	1.2	26
$^{186}W(^{16}O, f)$	137	103	0.015±0.008	22	12	0.22	3.1
$^{181}Ta(^{22}Ne, f)$	116	69	0.044±0.030	33	19	3.3	110
$^{181}Ta(^{22}Ne, f)$	174	120	0.081±0.030	37	21	0.35	4.4
$^{186}W(^{22}Ne, f)$	116	68	0.080±0.015	42	23	1.5	36
$^{186}W(^{22}Ne, f)$	174	119	0.046±0.015	27	15	0.14	2.0
$^{181}Ta(^{31}P, f)$	155	60	0.023±0.034	≤27	≤15	9.3	430
$^{181}Ta(^{31}P, f)$	195	94	0.047±0.030	22	12	0.81	17
$^{186}W(^{31}P, f)$	155	59	0.091±0.008	33	18	1.8	43
$^{186}W(^{31}P, f)$	195	92	0.033±0.009	20	11	0.27	3.6

*) 利用方程(6.5-1)计算出的.

采用图 6.5-2 所示的实验装置系统地研究了 ^{16}O 对W的感生裂变。图 6.5-6 是 90 和 97 兆电子伏 ^{16}O 感生 W 裂变在〈111〉方向上得到的阻塞图[42].可以看出在阻塞坑的中心出现了精细结构，这是由于通量峰效应引起的。

方程(6.5-3)所示的分析方法应用于重离子感生裂变寿命的研究，发现当 96 兆电子伏 ^{16}O 入射到钨晶上得到的最小产额同反冲方向和轴之间夹角的关系并不很明显，如图 6.5-7 上部所示的 96 兆电子伏 ^{16}O 对钨的作用。对核反冲"下沉"的主要影响是通过与 40 兆电子伏氧弹性散射得到的阻塞坑比较而揭示出来的。

弹性散射的最小产额大约低～0.15。图 6.5-7 的中间和下部的两对图表示，这种差别不是由于裂变碎片和氧多重散射的差别引起的。晶体温度下降到液氮温度时大大地减少了热振动引起的散射(图 6.5-7 的中部)，此时裂变碎片在〈100〉方向上的阻塞坑

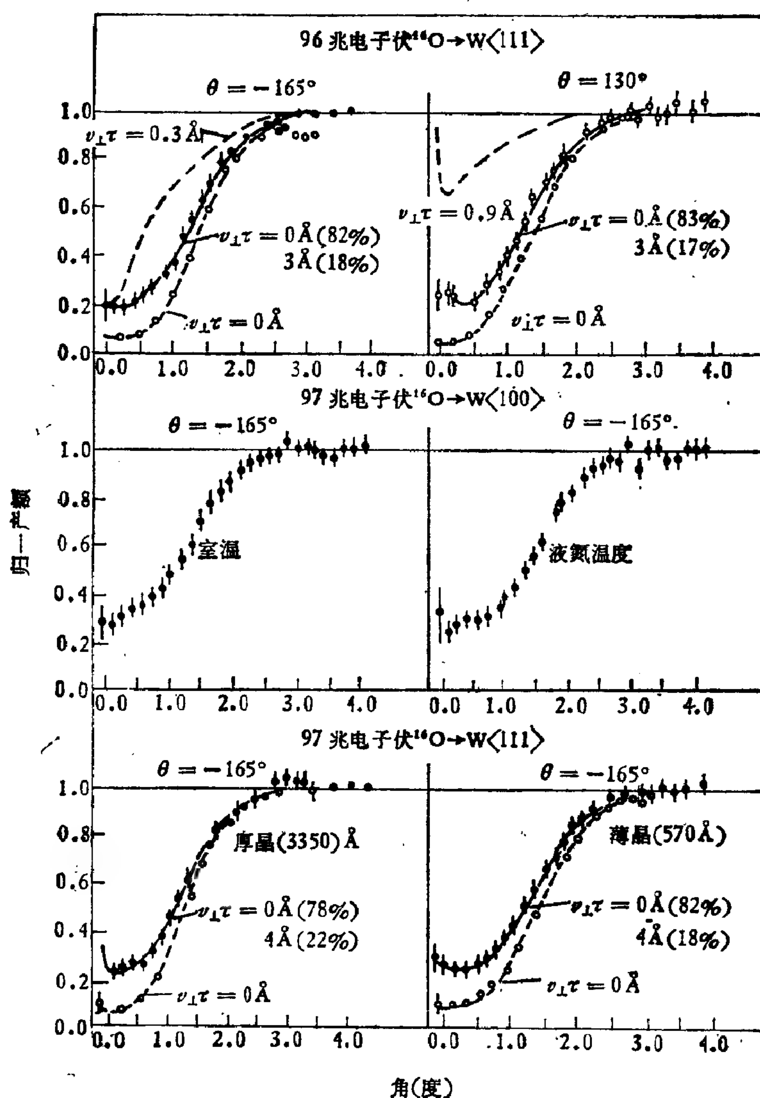


图 6.5-7 96 和 97 兆电子伏 ^{16}O 轰击 W 得到的裂变碎片的阻塞坑（黑点●）．不同晶体温度下入射束和不同晶轴之间夹角 θ 的结果．圆圈○为 40 兆电子伏 ^{16}O 弹性散射的阻塞坑．上部还包含了 $v_\perp\tau$=0.3 Å 和 0.9 Å 的模拟计算结果． 与圆点一起的实线是长、短寿命的裂变组分拟合的结果[42]

表 6.5-2 W(^{16}O, f) 数据两组合拟合结果[42]

能量（兆电子伏）	晶体	探测器角度*)	$v_\perp\tau$(Å)	长寿命 χ_L(%)
90	$W1$	−165	0.7	20.6±1.4
			0.5	23.5±1.7
90	$W1$	−165	0.7	22.9±0.5
			0.5	26.9±0.7
		−100	2.6	14.9±1.2
			3.0	15.0±1.2
94	$W3$	−165	1.0	23.5±0.6
			4.0	20.3±0.6
		130	4.0	21.4±0.9
96	$W1$	−165	1.0	25.8±1.0
			3.0	23.2±0.8
		−100	3.0	17 0±3.1
96	$W1$	−165	1.0	23.1±0.2
		−100	3.0	22.3±1.4
96	$W1$	−165	1.0	19.7±1.2
		−100	3.0	22.1±4.6
96	$W2$	−165	1.0	21.5±0.8
			3.0	18.4±0.8
		130	3.0	16.8±1.0
97	$W3$	−165	1.0	24.4±0.4
			4.0	21.5±0.3
		130	4.0	21.9±0.8
97	$W3$	−168	1.0	23.3±0.9
			4.0	19.8±0.6
		160	1.0	21.3±0.9
			4.0	18.2±0.7
97	$W4$	−165	2.0	18.3±0.5
			4.0	17.4±0.5
102	$W3$	−165	4.0	17.9±0.2
		130	4.0	15.4±0.6
108	$W1$	−165	3.0	10.9±0.6
		−100	3.0	10.9±2.4
108	$W3$	−165	4.0	13.7±1.2
		130	4.0	10.7±0.6
115	$W3$	−165	4.0	5.8±0.5
		130	4.0	4.1±1.8

*) 指探测器接收位置与入射束夹角.

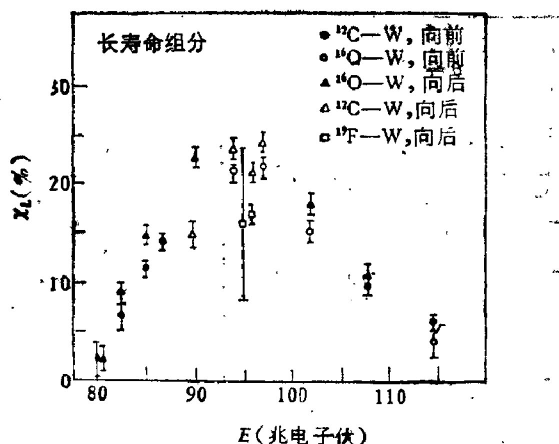


图 6.5-8 ^{12}C, ^{16}O 和 ^{19}F 感生 W 裂变中长寿命组分的百分比同入射粒子能量的关系．结果是从两组分拟合阻塞坑得到的[42]

变宽了，而最小产额却没有影响．图 6.5-7 的下图表明，在晶体厚度增加 6 倍时，裂变碎片和弹性散射氧的最小产额之差没有多大变化．这可解释为最小产额差是寿命长的裂变组分引起的，它相当于垂直于阻塞轴的平均反冲距离大．通过数据点的实线是相应于短寿命 ($v_\perp\tau=0$) 和长寿命 ($v_\perp\tau=2$ 或 3 Å) 叠加的结果．短寿命的阻塞坑是从氧弹性散射得到的，其标度因子是 $(Z_{ff}/Z_O)^{1/2}\cdot(E_O/E_{ff})^{1/2}$ (其 Z 和 E 是裂变碎片和散射氧的核电荷和能量)；长寿命的阻塞坑是用“统计平衡多原子列近似”(§ 5.2) 理论计算的．不过在拟合中选取参数有几点值得注意：第一，裂变阻塞坑的归一化必须看成可调参数，因为在某些情况(如图 6.5-7 的左上方)下随机产额很不确定；第二，仔细选取长寿命组分的平均反冲距离；第三，拟合的角度范围应有一个确定的上限．对于只有两个寿命组分的拟合，可以选取阻塞坑底部头六点作最小产额的平均，这样比较符合实际．

表 6.5-2 是各种能量下氧入射到钨晶上实验数据的分析结果．大多数情况都是采用很短和“很长”反冲的两组分拟合得到的．只有能量为 90 兆电子伏，角度 $\theta=-165°$ 时存在着较明显的中间

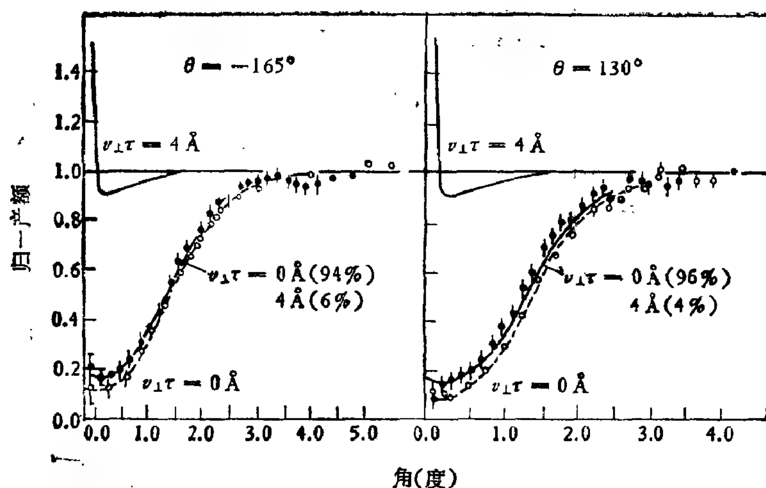


图 6.5-9 115 兆电子伏 ^{16}O 轰击 W 的裂变阻塞坑以及长寿命和短寿命组分拟合值

寿命的组分. 在 90 兆电子伏测量时背探测器 (图 6.5-2) 同反冲 $v_\perp\tau = 0.7$ Å 的长寿命组分拟合很好,前探测器相应的反冲要大 4 倍,接近 3 Å.

对于中等能量 (94—97 兆电子伏),选取 $v\tau \simeq 4$ Å 的反冲来拟合数据, 这个量级相当于背探测器的 $v_\perp\tau \simeq 1$ Å. 选取 $v\tau \sim 4$ Å 是根据阻塞坑中有精细结构的分析,在这个能量区域, 阻塞坑呈现与反冲方向相关的不对称性 (图 6.5-6 所示).

从表 6.5-2 可以看出, 长寿命组分的多少随入射能量的增加而改变. 图 6.5-8 给出氧轰击钨裂变含长寿命组分的百分数同轰击能量的关系. 轰击能量高时 χ_L 的量大大减弱,因为高角动量裂变度增加. 而且,由于裂变前要蒸发的中子数目增加,复合核初能量增加本身就会减少低激发能的裂变. 图 6.5-9 是氧轰击能量为 115 兆电子伏测量分析的结果, 显然长寿命组分已经很少了. 图 6.5-8 中未能给出较低能氧轰击 W 的裂变值, 这是因为实验上比较困难, 但是给出了 ^{12}C 的结果. 图 6.5-8 还示出在用背探测器 ($\theta \simeq 165°$) 时具有较高的 χ_L 值, 这是与裂变产物角分布的各向

异性造成的。

通过阻塞效应测得裂变中长寿命组分的能量(轰击能量)关联与裂变过程简单的物理图象所预言的结果符合很好。如果进一步把寿命测量同裂变截面、裂变产物角分布联系起来,将对裂变物理过程提供定量信息。

四 基本粒子寿命

七十年代初就提出用阻塞法测量基本粒子的寿命[49],其原理和复合核寿命的测量相似。不过,高能物理中确定粒子寿命的情况显然要比核物理复杂,因为在低能核物理中整个复合核沿着入射粒子方向反冲,而高能物理中产生的不稳定粒子动量方向事先是不知道的,产生过程的类型是非弹性的,即入射粒子同晶格原子核中的单个核子发生碰撞的结果,而不是同整个原子核碰撞的结果。根据葛劳伯(Glauber)理论[50],在原子核上的产生过程,特别是产生角度,可用单个自由核子上的产生过程乘以原子核边缘处有效核子数所给出的一个因子(因为其它核子由于强吸收作用而对这个反应不是有效的散射体。

粗略估计用阻塞法测定基本粒子寿命的范围,假定不稳定粒子在角度θ以速度$v(v\approx c)$离开原子列,在静止坐标系中其寿命为τ,那么平均横向反冲距离是

$$r_\perp = v\gamma\tau\sin\theta = v_\perp\gamma\tau \tag{6.5-4}$$

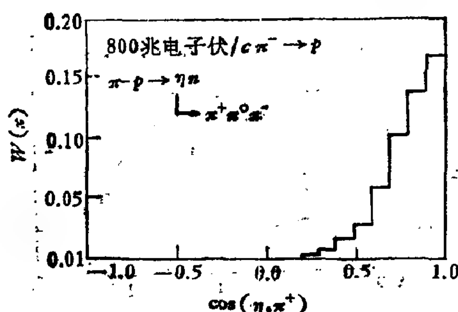


图 6.5-10 800 兆电子伏/c 的 π^- 入射 Ge 晶,经 $\pi^- + p \longrightarrow \eta + n$ 反应后,实验室坐标系中 η- 介子的角分布

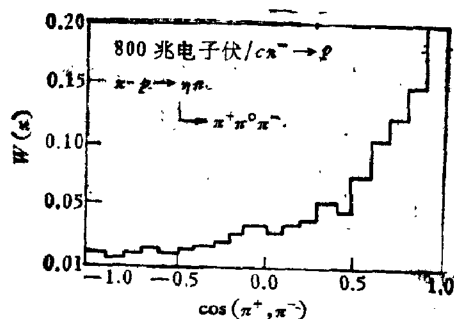


图 6.5-11 η 衰变得到实验室坐标系中 π^+ 角分布

这里，γ 为相对论因子。为了要利用阻塞法测寿命必须

$$\rho_2 < r_\perp < d \tag{6.5-5}$$

ρ_2 为热振动振幅，d 为原子列上的原子间距。取 $\rho_2 \approx 0.1$ Å，$d \simeq$ 4.0 Å，则寿命的范围应在

$$10^{-20} \text{秒} < \tau < 10^{-17} \text{秒} \tag{6.5-6}$$

下限的实际要求是要较大的 γ，但 θ 又不能太小。这与复合核寿命范围略有不同。

由于 η(549) 粒子的产生具有大的反应截面，且 $\pi^+\pi^0\pi^-$ 是主要衰变道，例如，当不同能量的 π^- 束打到氢上时，产生 η 的截面在实验室坐标中动量 $P_L = 800$ 兆电子伏/c 处有一个峰值，约～3 毫巴。加上现有方法估计 η 的寿命值约 $\sim 7.7 \times 10^{-19}$ 秒[53]。这个值是在 (6.5-6) 式估算范围之内，但各次实验结果差别很大，有时达 3

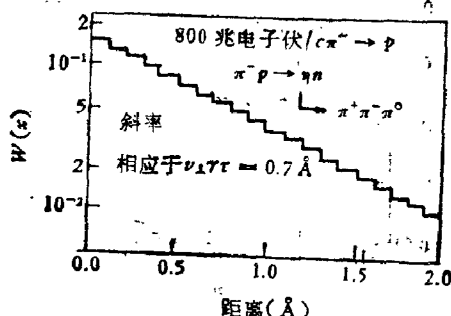
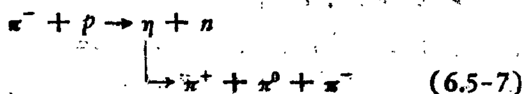


图 6.5-12 η 粒子衰变前所走过的横向距离分布(对数标度)

倍．因此，选择 η 粒子寿命的测量是较为合适的．

蒙特-卡罗模拟计算是选用 800 兆电子伏/c 的 π^- 介子入射到锗晶靶上，模拟 η 的产生事件和衰变事件[52]．其反应过程为



$$\pi^- + p \to \eta + n, \quad \eta \to \pi^+ + \pi^0 + \pi^- \qquad (6.5\text{-}7)$$

并把 π^- 以接近平行于晶体〈110〉轴方向入射，以便在探测器中得到 π^+ 的最大计数率，因为所产生的 η，包括衰变成 π^+ 粒子在实验室坐标系中是向前的．图 6.5-10 给出实验室坐标中 η 介子的角分布，在质量中心系中它近似为各向同性的．图 6.5-11 是 η 衰变后 π^+ 介子的角分布，表明 π^+ 介子有一个向前方向的出射锥，其动量同入射束方向的夹角小于 60°．由于 π^+ 粒子以不同速度发射，所以临界角也会有一个展宽．图 6.5-12 示出 η 粒子衰变之前所走过的横向距离分布(对数标度)．从中可以得到，用有效值 $v_\perp\gamma\tau \simeq 0.7$ Å 可拟合很好(即图中所表示的斜率)．利用这个数据，可立即计算出从晶体出射 π^+ 介子在〈110〉方向确有一个下沉的结构，如图 6.5-13 所示．如果采用 $5\times10^7\pi^-$ 介子/厘米^2·秒$^{-1}$、动量为 800 兆电子伏/c、靶厚为 1 毫米的 Ge 单晶，则 η 的产生率为 10000/秒，η 的衰变率 2500/秒．那么，π^+ 介子进入沿〈110〉方向最小立体临界角(≤1 毫弧度)的数目为 5/小时．这个数值还没有考虑立体角内分布的不均匀性，π^+ 粒子有很强的向前峰．因而实际值会比这个大得多．

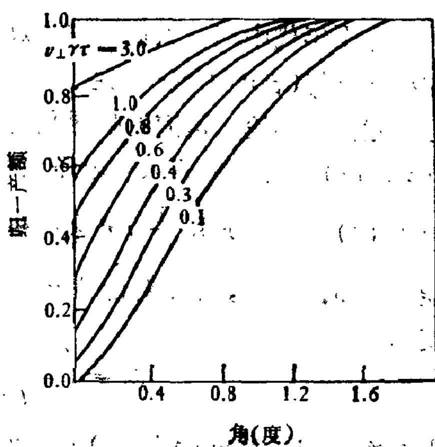


图 6.5-13 不同 $v_\perp\gamma\tau$ 值所预期的阻塞坑

当然用阻塞法测量 η 粒子寿命时还要考虑：(i) 如何确定 η

事件．由于核子有费米运动，所以用中子反冲来确定 η 事件是不可能的，而是采用探测 π^+ 和 π^0 衰变的 γ 符合来确定 η 产生事件．虽然 $\pi^- p$ 反应有许多过程（例如，$\pi^+\gamma$ 信号也有贡献），但是 $\pi^- p \to \eta n \to \pi^+\pi^0\pi^-$ 的反应占主要的，约为 0.8 毫靶，其它反应只是本底计数；(ii) 必须有相应的"瞬发" π^+ 分布（类拟图 6.5-1 和图 6.5-7），来同上述"缓发" π^+ 进行比较．"瞬发" π^+ 介子可以从几个不同的反应得到，但主要的反应是



$$\pi^+ + p \to \pi^+ + \pi^- + n$$

在 800 兆电子伏/c π^- 介子入射时，这个反应截面约是 (6.5-7) 式反应的 10 倍，所以很容易得到瞬发 π^+ 的分布；(iii) 采用 Ge 晶还可作为能量损失探测器，以便把沟道粒子同随机粒子区分开来．

§ 6.6 高能沟道效应

七十年代中期，人们把沟道效应的实验从低能（兆电子伏）区域推向高能（吉电子伏—几百吉电子伏）区域[53,54]．根据低能沟道已经建立的理论，沟道的临界角将随着入射粒子能量增加而减少[(5.1-12) 式]．在进入吉电子伏能区，所发生的变化仅是将 (5.1-12) 式中的 E 用 $\frac{1}{2}Pv$ 来代替，v 为入射粒子速度，P 为相对能的动量．因而，在相对论情况下，轴沟道的临界角 (5.1-12) 式变为

$$\psi_1 = \left(\frac{4Z_1Z_2e^2}{Pvd}\right)^{1/2} \tag{6.6-1}$$

平面沟道的临界角 (5.1-38) 式变成

$$\psi_p = \left(\frac{4Z_1Z_2e^2d_pCa}{Pv}\right)^{1/2} \tag{6.6-2}$$

表 6.6-1 给出 100 吉电子伏粒子对 Si、Ge 和 W 晶体的临界角，从几十微弧度到一百个微弧度．实验表明，在这样高的能量下进行沟道实验不仅对揭示沟道效应物理过程（如能量损失和退道）有重要作用，而且出现一些新的物理现象和应用可能性．

一 实验方法

高能沟道实验在方法上与低能主要不同点是：入射束并不一定准直的很好，束流发射角常常远大于临界角，用放置在晶体前后几组的二维位置灵敏漂移室来确定入射粒子和出射粒子的轨迹。图 6.6-1(a) 是实验的几何安排，其中 DC_1，DC_2 和 DC_3 为三个漂移室组件，DC_1 和 DC_2 确定入射束的位置，DC_2 和 DC_3 确定出射束的位置（角度）；闪烁计数器 U，d，C_2 和 C_1 确定束流的方向，H 是限定计数器，中心具有长方形的小孔对准晶体，用反符合限定束流截面的大小；$\check{C}$ 为契仑柯夫计数器，用以选择高能入射粒子，因为束流中含有 π^+，K^+，p，π^-，K^- 和 $\bar{p}$ 等各种量子。

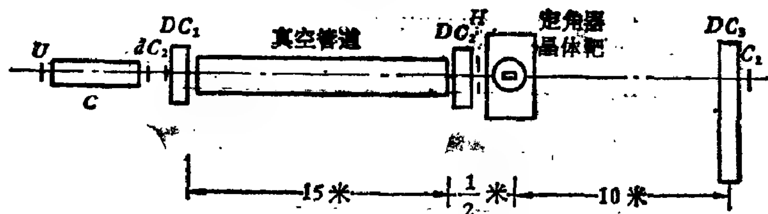


图 6.6-1　高能沟道实验的几何安排：U、d、C_2、H 和 C_1 为闪烁计数器；DC_1，DC_2 和 DC_3 为漂移室组；$\check{C}$ 是契仑柯夫计数器

可绕方位角和极角转动的定角器应用步进马达遥控，靶室的真空度为 3×10^{-6} 托。

在图 6.6-1 中，DC_1 和 DC_2 大小相同，为 12.5×12.5 厘米^2，而 DC_3 大约是 DC_1 的两倍。每个漂移室组件包含 4 个 x 平面和 4 个 y 平面，如图 6.6-2(a) 所示。信号丝在 x 平面内是竖直方向的，在 y 平面内则是水平方向的。图 6.6-2(b) 是一组两个漂移平面，每个平面中的信号丝之间的距离为 42 毫米。信号丝之间为电位丝，从而在信号丝之间形成两个漂移"格"。丝平面两边夹着场整形电极，用于在漂移区产生均匀电场。相邻两漂移平面中的信号丝错位 21 毫米，这样就可以分辨出左右不确定性。如果只有一个漂移平面，带电粒子进入漂移区可产生信号但不能告

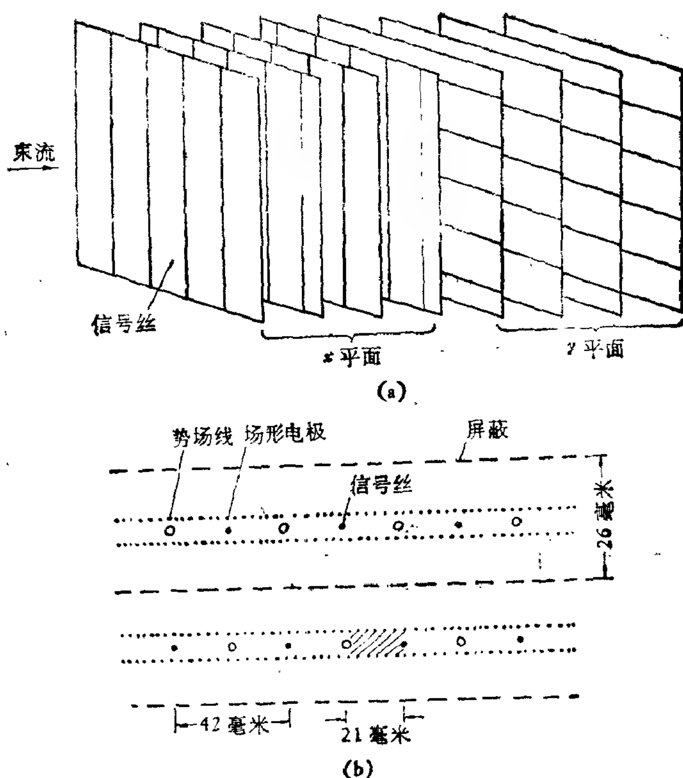


图 6.6-2 (a) 一个漂移室组件中 4 个 x 平面和 4 个 y 平面. 在两相邻平面中信号丝错开，如(b)所示；(b) 一个漂移室两个平面各种丝的相对位置，影线部分为漂移"格"

诉人们粒子是从丝的哪一边穿过的. 漂移室采用如下混合气体，即 67.2% 的氩，30.3% 的丁异烷和 2.5% 的甲烷，并且以大气压力使其缓慢流入和流出漂移室.

图 6.6-3 示出选择好事件的触发逻辑示意图. 闪烁计数器 U，d，C_1 和 C_2 符合及 H（中心有孔）反符合线路选择束流粒子. 用触发信号开启晶体来的放大信号，送到模数转换器（ADC）和两个单道分析器. 两个单道分析器在总脉冲高度谱中限定了上下窗口，可利用这种上下窗口的计数之比来确定晶轴的方位. 这样，晶体本身就作为能量损失探测器被用来选择满足沟道条件的粒子.

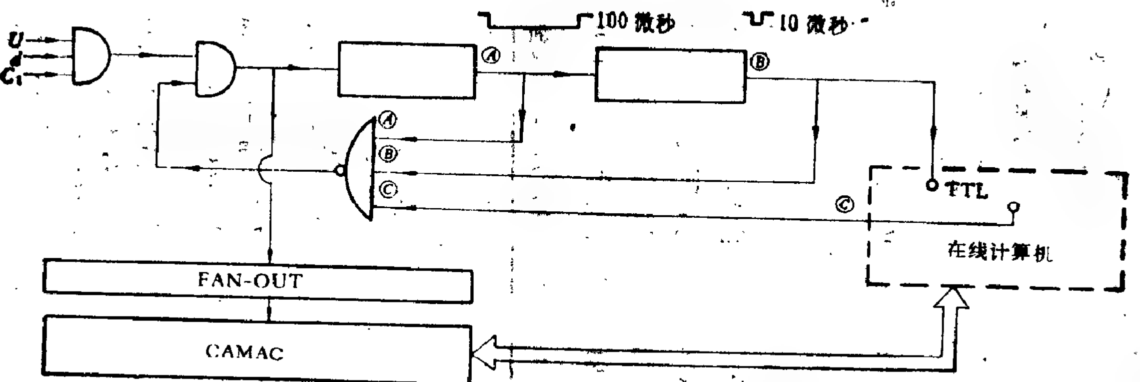


图 6.6-3 选择好事件的触发逻辑[94]

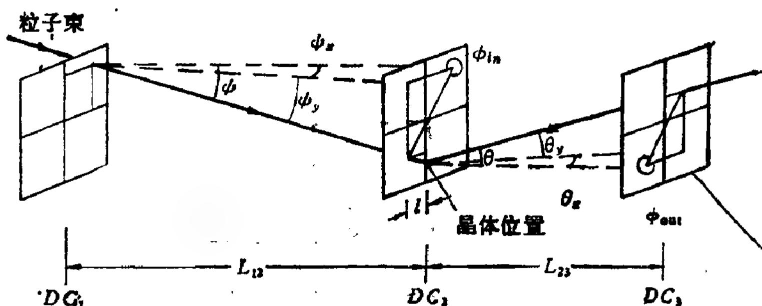


图 6.6-4 用三个漂移室组件的位置表示束流粒子入射角和出射角

触发脉冲还用来启动所有时间-数字转换器（TDC）。三个漂移室组件中的 48 根信号丝均通过甄别器一一联到 TDC 上。束流中任何一个带电粒子在靠近一根信号丝穿过漂移室时所产生的信号都会使相应的 TDC 停止计数，而同没有粒子穿过的其它丝相连的 TDC 均读出"溢出"数。触发脉冲还启动，通过接口把 TDC 和 ADC 数据输入到在线计算机，并清除所有的 TDC 和 ADC 内存以

表 6.6-1 数据分析中所用的公式及含义

定 义	计 算 方 法
能量损失	ΔE
投影入射角	$\phi_x = (x_2 - x_1)/L_{12}$ $\phi_y = (y_2 - y_1)/L_{12}$
投影出射角	$\theta_x = \dfrac{x_3 - x_2}{L_{23} - l} - \dfrac{x_2 - x_1}{L_{12}(L_{23} - l)}$ $\theta_y = \dfrac{y_3 - y_2}{L_{23} - l} - \dfrac{y_2 - y_1}{L_{12}(L_{23} - l)}$
投影散射角	$\Delta\theta_x = \theta_x - \phi_x$ $\Delta\theta_y = \theta_y - \phi_y$
散射角	$\Delta\theta = (\Delta\theta_x^2 + \Delta\theta_y^2)^{1/2}$
入射角	$\phi = (\phi_x^2 + \phi_y^2)^{1/2}$
出射角	$\theta = (\theta_x^2 + \theta_y^2)^{1/2}$
入射方位角	$\phi_{in} = \mathrm{arc\,tg}(\phi_y/\phi_x)$
出射方位角	$\phi_{out} = \mathrm{arc\,tg}(\theta_y/\theta_x)$
散射方位角	$\Delta\phi = \phi_{out} - \phi_{in}$
径向散射角	$\delta\theta = \lvert\theta - \phi\rvert$

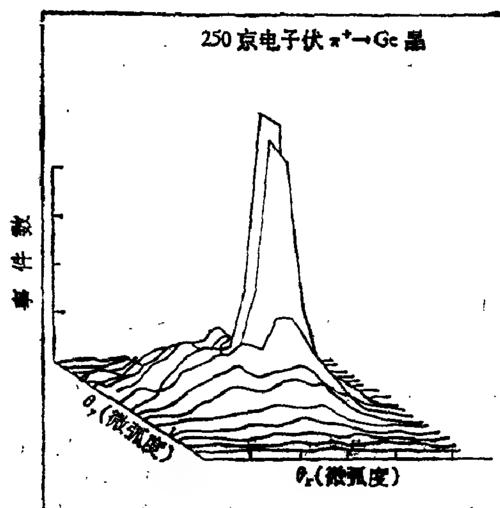


图 6.6-5　250 吉电子伏 π^+ 在 Ge 晶上投影出射角分布，呈现沟道效应立体图

备接收下次事件.

图 6.6-1 所示的几何安排进行高能沟道实验的参数计算与低能(兆电子伏)背散射实验(图 6.1-2)完全不同. 它们是通过三个漂移室组件的位置坐标 x_1、y_1、x_2、y_2、x_3、y_3 计算得到的，图 6.6-4 所示. 表 6.6-1 列出计算公式和含义. 沟道参数测量的分辨率. 取决于三个漂移室组件位置计算的分辨率和系统各部件的多重散射.

如果入射粒子是沟道的，在相对于轴或平面方向小角出射的几率大. 这些粒子在投影平面内的分布沿着轴或平面方向有峰值. 图 6.6-5 是 250 吉电子伏 π^+ 经过 Ge 晶在出射角平面内的分布. 参数由表 6.6-1 的公式算出.

二　透射粒子角分布

图 6.6-6 给出不太高能下 π^+ 透过单晶 Ge 的透射粒子角分布. 当 1.35 吉电子伏/c 的 π^+ 粒子以角度 $\phi \gg \phi_1$ 入射到晶体时，经晶格原子的多次散射后，出射粒子的角分布 (a)，其主要部

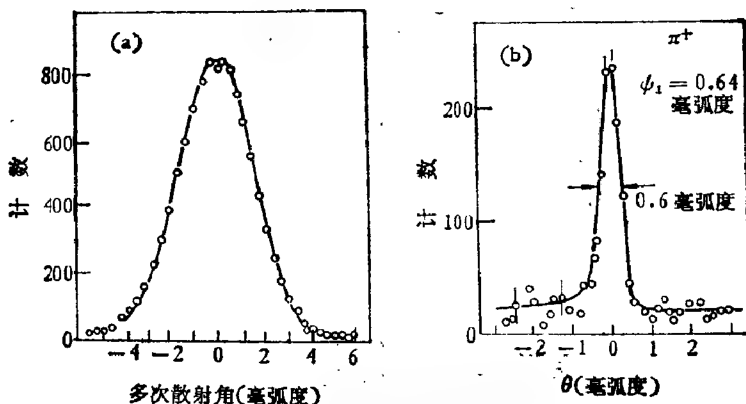


图 6.6-6 (a)1.35 吉电子伏/c 的 π^+ 随机入射到 0.67 毫米厚 Ge 晶中，经多重散射后出射的角分布，实线为多重散射理论计算结果. (b)1.15 吉电子伏/c 的 π^+ 的透射强度角分布，晶体厚度为 1 毫米，入射束沿 ⟨110⟩ 方向[53]

分可用第二章中的多次散射理论来描述. 当 $\phi \leqslant \phi_1$ 时，透射粒子的产额要比 $\phi \gg \phi_1$ 时大近十倍，沿沟道方向的透射率显著增加，呈现了非常窄的角分布［图 6.6-6(b) 所示］. 实验所得到峰的半宽度为 0.6 毫弧度，与理论 (6.6-1) 式得到 $\phi_1 = 0.64$ 毫弧度很接近，峰和本底之比约是 10.

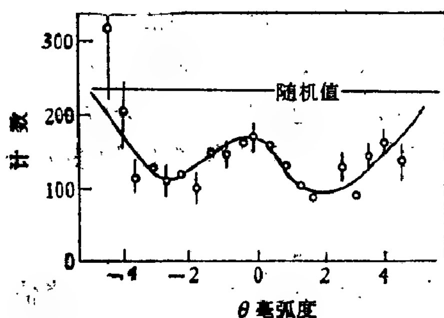


图 6.6-7 1.15 吉电子伏 c 的 π^- 透射强度的角分布. 条件与图 6.6-6(b) 一致[53]

图 6.6-7 还示出 π^- 沿 ⟨110⟩ 方向的透射分布，它和电子在沟道中运动的情形类似*). 由于它们与晶格原子相互作用为吸引力，所以其运动特点与带正电粒子不同. 当 θ_{in} 小时透射率减小，但在中心处又出现峰值，这是因为 π^- 粒子以螺旋线绕晶轴向前运动构成

*) 带负电轻粒子在沟道中运动特点，第十章将细述.

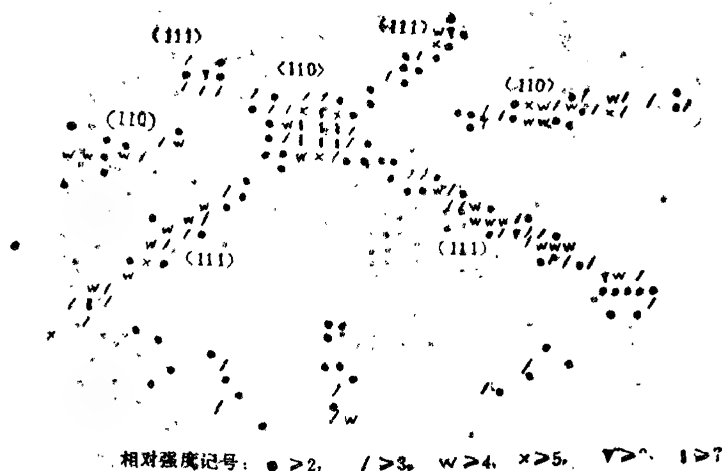


图 6.6-8 15 吉电子伏/c 质子入射到 4.2 毫米厚 Ge 单晶上. 图为计算机数据输出的再现，给出相对强度同入射角之间的关系(粒子在晶体中散射角度小于 0.1 毫弧度). 黑的区域表示粒子强度大. 每一点所代表的强度是 0.05×0.05 毫弧度格子内的强度. 可以清楚地看出轴和平面的位置[15].

束缚状态的轨迹，使透射率有所增加. 角分布下沉的坑为 50%，半宽度达 8 毫弧度 ($\gg \psi_1$).

分析时采用小角散射会进一步减小本底. 图 6.6-8 和图 6.6-9 分别给出能量为 15 吉电子伏质子和 π^- 介子透过 4.2 毫米厚的单晶 Ge ⟨110⟩方向后，在入射角空间中的分布$\left(\text{总散射角} \simeq \frac{1}{2}\psi_1\right)$. 我们可以看到，类似于图 6.6-6(b)和图 6.6-7，这两种情况绕⟨110⟩轴均有一个峰，但是质子的峰比 π^- 峰强度大而宽度窄. 在峰的周围强度都有下沉，而且 π^- 的下沉很宽，直到图的边缘处才出现随机值. 对于负粒子，看不到平面的沟道效应(图 6.6-9). 但是，图 6.6-8 却可清晰地看到轴 ⟨110⟩ 沟道和两条 (111) 面沟道及一条 (110)面沟道，这与图 6.1-5(c) 相符合.

要仔细考察在轴周围强度的变化，须以⟨110⟩为中心作环形积分. 图 6.6-10 就是 2，6 和 15 吉电子伏/c 质子穿过 0.3，0.7 和



图 6.6-9 15 吉电子伏/c π^- 介子入射到 4.2 毫米 Ge 单晶上. 条件和图 6.6-8 相同. 图中没有面沟道出现[38]

4.2 毫米厚 Ge 晶和 9 毫米 Si 晶得到这种积分的强度角分布. 0.9 毫米 Si 晶得到的随机多重散射与 0.3 毫米的 Ge 相同. 图中所绘的是穿过晶体散射角小于截角 α 的透射粒子的分数. 图 6.6-10 (a)—(d) 给出透射与晶体厚度的关系. 就 Ge 晶而言，其峰值与晶体厚度的变化关系不大(几乎没有退道)，但本底却因厚度增加而削减. 图 6.6-10(b)、(e) 和 (f) 可看出截角 α 变化的影响. 由于实验中 15 吉电子伏/c 质子的角分辨率为 $\sim \frac{1}{3}\psi_1$; 因此角度 α 小于 $\frac{1}{3}\psi_1$ 就判断不准确. 图 6.6-10(e) 中 α 是角分辨率的两倍，峰强度达到 75%. 由于随机方向的多重散射正比于晶体的厚度和相对论动量，所以，透射的沟道效应在 2 吉电子伏/c 和 4.2 毫米厚的晶体中最为明显，但是，此时探测器分辨率的影响大于 15

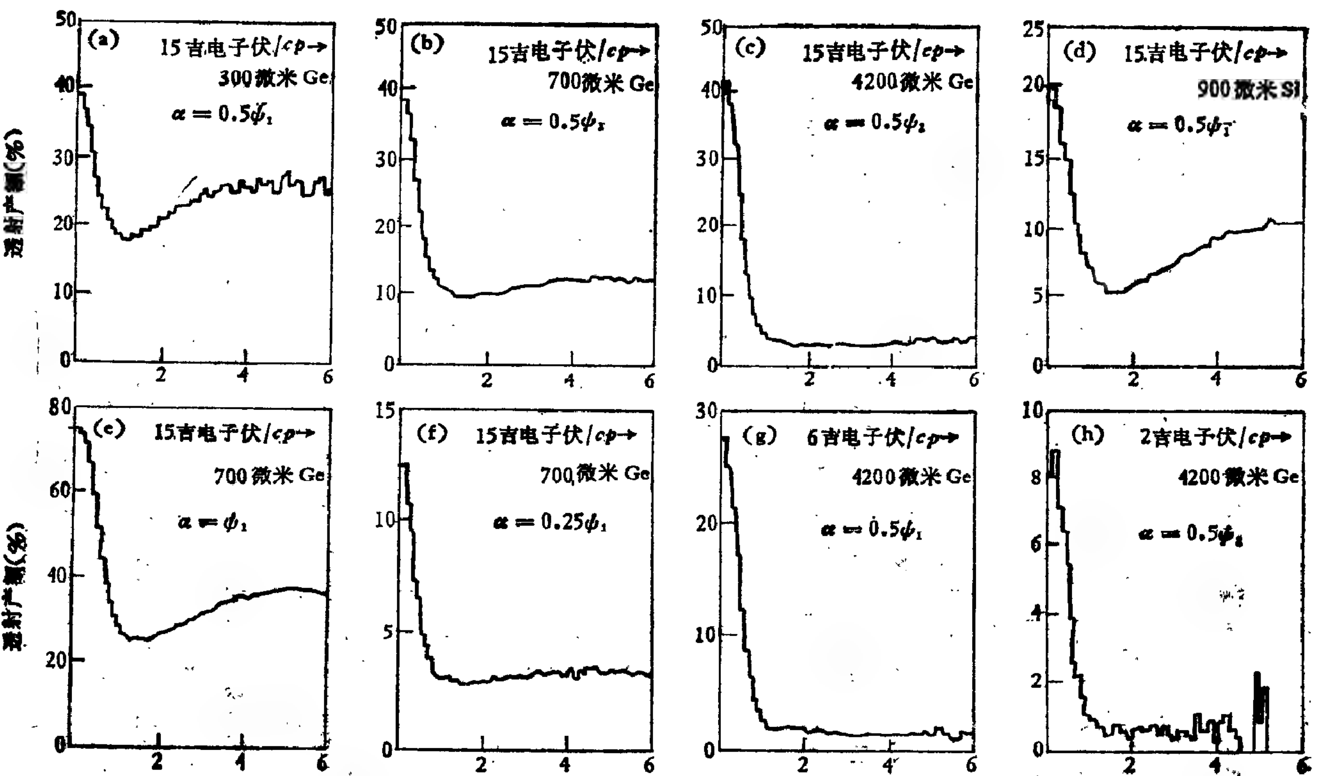


图 6.6-10　透射产额随入射角的变化(相对于<110>轴)：(a) 15 吉电子伏质子穿过 0.3 毫米 Ge；(b) 0.7 毫米 Ge；(c) 4.2 毫米 Ge；(d) 0.9 毫米 Si；(g) 6 吉电子伏质子和 (h) 2 吉电子伏质子穿过 4.2 毫米 Ge 晶．上述情况截角 $\alpha=\frac{1}{2}\psi_1$；(e) 和 (f) 中的截角 α 分别为 ψ_1 和 $\frac{1}{4}\psi_1$[55]

吉电子伏/c 的情况，峰-本底之比是 ~15。

三　环形效应——横能量均衡特性

当一个很细的粒子束入射到晶体上，从出射角空间强度分布的三维图象中可以看出，粒子由于在晶体中多重散射引起角分布的变化。图 6.6-11 是 15 吉电子伏/c 质子和 π^- 介子穿过 0.3 毫米厚 Ge⟨110⟩ 方向得到的散射图。透射束的强度分布是按出射角 θ（即出射方向同⟨110⟩轴的夹角）绘制的。图中小长方块表示入射束的方位（实际是扇形），其方位角展宽为 30° 和径向展宽为 ~0.1 毫弧度。图 6.6-11 表明粒子在晶格中由于原子列的相关散射使其绕⟨110⟩轴向为中心形成一个环形分布，而沿⟨110⟩轴是一个极小。因此，在方位角方向散射很强，而径向分布的多重散射就比较小。

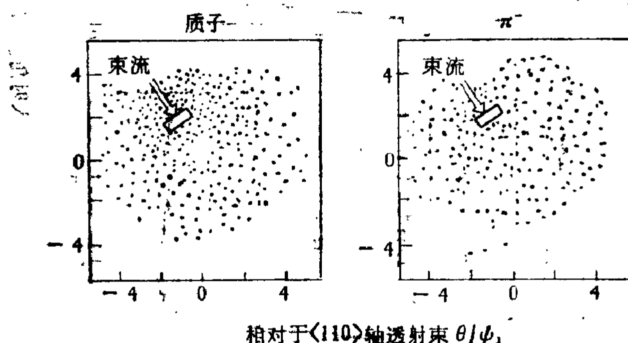


图 6.6-11　15 吉电子伏/c 质子和 π^- 穿过 0.9 毫米 ⟨110⟩Si 晶在出射角空间的三维散射图[11]。箭头所示的长方块（扇形）是入射束的方位，离轴 2—2.5ψ_1 远。图中心为⟨110⟩方向

为子仔细观察上述现象，把束流对一定方向扫描。图 6.6-12 给出 15 吉电子伏/c 质子 (a) 和 π^- (b) 穿过 0.7 毫米 ⟨110⟩Ge 晶的透射强度的出射角分布同入射束方向的关系。入射束的位置用方块符号记在图中。由上到下算，头 4 个图 (1—4) 相应于入射角从零到 ψ_1。这时质子已开始在中心位置有明显的极小值，π^- 沿轴方向是极大值，表明准直很好（临界角以内）的负粒子横能量扩散

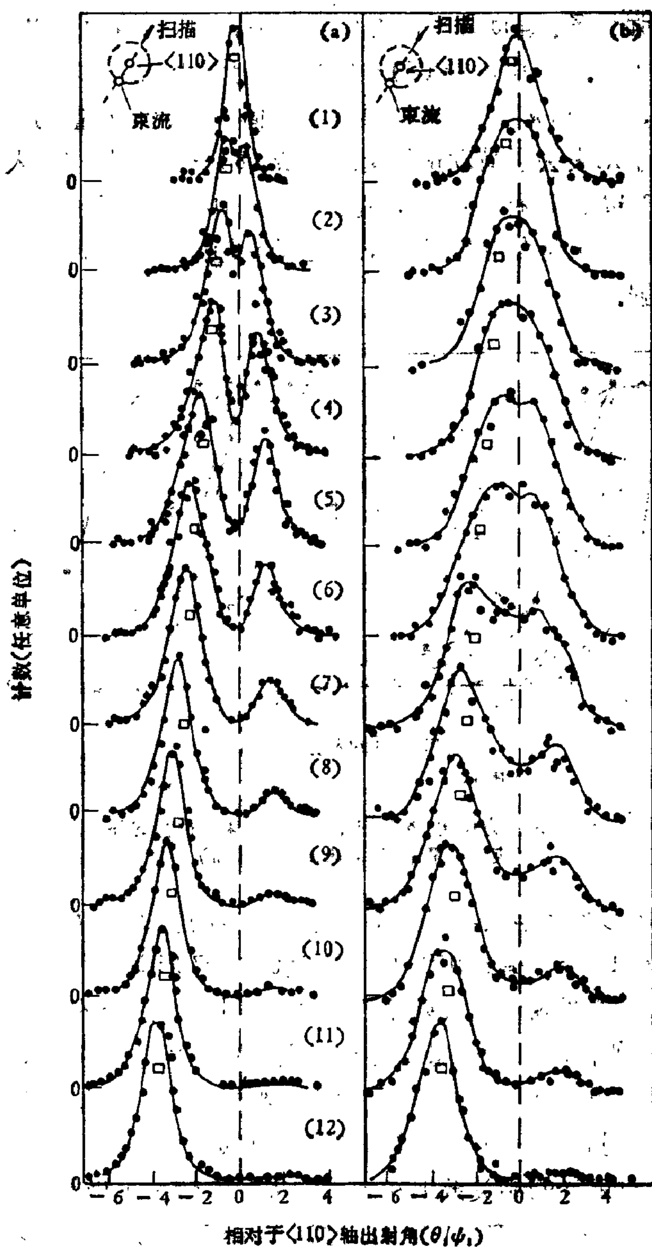


图 6.6-12　15 吉电子伏/c 质子(a)和 π^- 介子(b)穿透 0.7 毫米 Ge〈110〉晶体得到环形图的垂直扫描(扫描方向示于图顶)，扫描是出射角的函数．从(1)—(12)相应于不同的入射方向(入射束的位置用方块□表示)[50]

比正粒子强得多。强度几乎同方位角无关，显示出横动量 $P_\perp$ 具有完整的均衡性。图中谱线(5)—(7) 相应于入射角在 ψ_1 和 $2\psi_1$ 之间。这时，质子和 π^- 沿轴向均具有极小值，π^- 的横动量仍有均衡性，而质子却失去了横动量均衡。曲线(8)—(12) 相应于入射角为 $2\psi_1$—$3.3\psi_1$。这种厚度(0.7 毫米)晶体中横能量已不可能建立均衡。总的情况是负电粒子比正电粒子易趋向平衡，说明负势比正势散射强。

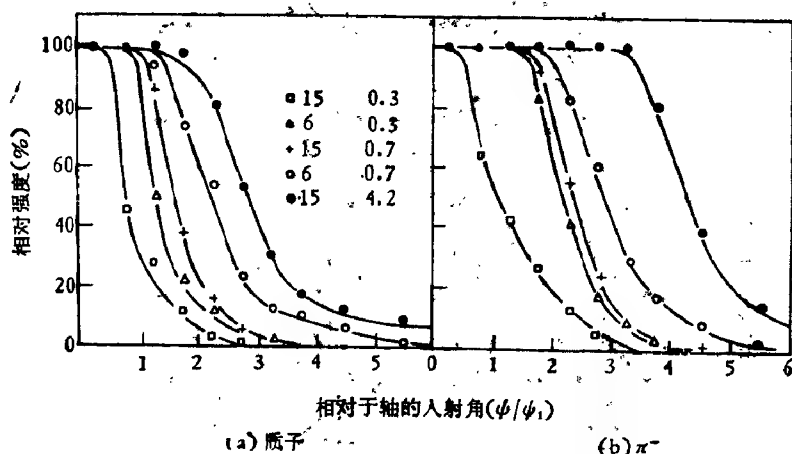


图 6.6-13 离束流方位角 180° 的环形强度同束流位置的强度之比（束流能量不同，晶体厚度也不同）

上述环形图案中最突出的特征是在入射角 $\psi > \psi_1$ 时的情形。图 6.6-13 给出偏离束流方位角 180° 的环形强度同束流位置的强度之比，曲线表示同入射角的关系(入射束同晶轴的夹角)。由图看出，一般情况下横能量高要求多原子列碰撞才能使横动量随机化，而且，在环形图形成中负势比正势更有效。图 6.6-12 和图 6.6-13 都表明临界角 ψ_c 并不是环形图案形成的极限角度。实际上，原子列对束流的相关散射在大于临界角的情况下仍然存在。这种情况在高能时尤为突出，因为这时临界角都很小。

计算晶体多厚才能使入射的横动量趋于随机化可有两种方法：(i) 分析形式，第五章的统计平衡模型；(ii) 二体碰撞的计

算机模拟。根据林哈德模型有

$$\lambda_{\perp}=\frac{4\phi}{\pi^{2}Nda\phi_{1}^{2}} \quad \phi<\phi_{1} \tag{6.6-3a}$$

$$\lambda_{\perp}=\frac{4\phi}{\pi^{2}Nda\phi_{1}^{2}}[(\phi/\phi_{1})^{2}\rho_{2}/a] \quad \phi>\phi_{1} \tag{6.6-3b}$$

这里，ρ_2/a 的量级为 $\frac{1}{2}-1$，ρ_2 为均方振幅。利用林哈德静止原子列标准势 [(5.1-6) 式]，对于 $\phi\lesssim\phi_1$，求出 $\lambda_\perp$ 值的量级与方程(6.6-3a) 给出的相同。不过，这时负电粒子的 $\lambda_\perp$ 比正电粒子长一些。而当 $\phi>\phi_1$ 时，负电粒子 $\lambda_\perp$ 的实验值比正电粒子短。这些都与二体碰撞的计算机模拟结果一致[55]。

图 6.6-14 给出 15 吉电子伏/c 质子环形图案形成的计算机模拟，并同实验结果相比较。在计算中，平行束以入射角 $\phi=2\phi_1$ [相对于⟨110⟩轴]进入 Ge 单晶。在实验中，入射角的径向展宽是 0.05 毫弧度及方位角展宽为 30°。由于计算机的时间问题，计算时所考虑的晶体厚度较薄。实验上环形图案的径向展宽大于计算的分布，其原因是：(i) 入射束的角分散；(ii) 实验的角分辨率以及 (iii) 较厚晶体引起的退道。

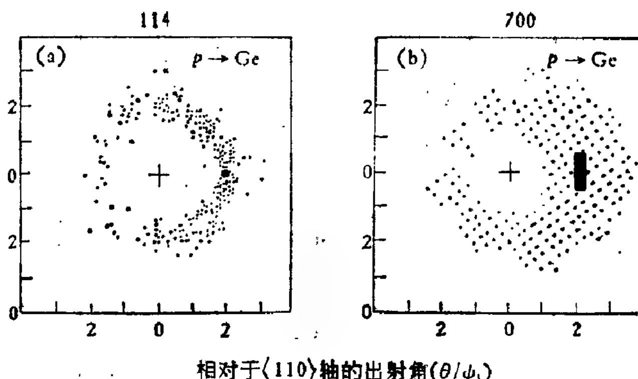


图 6.6-14　15 吉电子伏/c 质子环形图案形成的计算机模拟(a)和测量结果(b)。晶体为 0.7 毫米厚的 Ge 晶，计算中束流很窄(图中的黑点●)而实验束相当宽，这是因为实验上要考虑角分辨率的问题

四 弯曲晶体的沟道效应

晶体的沟道可以导向带电粒子，使各种近碰事件（如核反应，离子感生 X 射线发射等）大为减弱。这种沟道效应及其应用，我们已经在上一章和本章讨论了不少。然而，当晶体弹性弯曲使晶格的沟道也发生弯曲时，粒子在弯曲的沟道中运动情况将会怎样？根据连续模型和汀葛罗夫（Tsyganov）[56] 的思想，认为把晶体弯曲，就相当于在晶格的沟道中引进一个离心势，从而把沟道势阱一边提高，另一边降低，如图 6.6-15 所示。在平面沟道情况下，连续势可表示成

$$U(y, R) = V(y) + \frac{Pv}{R} y \tag{6.6-4}$$

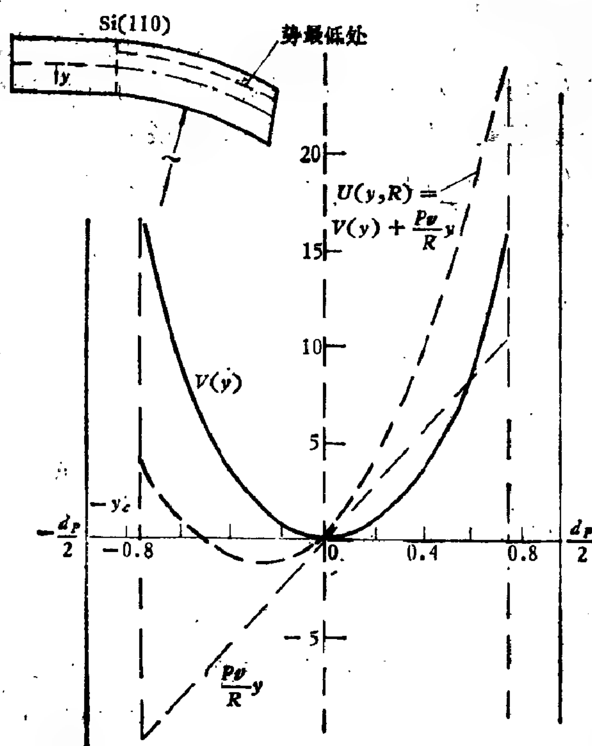


图 6.6-15 弯曲 Si 单晶（110）平面的势阱形状

表 6.6-2　100吉电子伏/c 粒子的沟道特性

晶　　体	硅	锗	钨
Z	14	32	74
A	28.09	72.59	183.85
ρ	2.35	5.33	19.3
⟨110⟩ 轴沟道临界角(微弧度)	46	68	138
(110) 面沟道临界角(微弧度)	16	20	34
最大弹性弯曲半径(1 微巴，厘米)	76	~76	94
临界场[(110)面,伏/厘米]	0.61×10^{10}	1.28×10^{10}	4.73×10^{10}
汀葛罗夫(Tsyganov)半径[(110)面,厘米]	16.3	7.8	2.1
等效磁场[兆高,(110)面]	20	43	160
核扩散长度[⟨110⟩轴,室温]	10.3	2.2	1.7
电扩散长度[⟨110⟩轴向,厘米]	6.44	7.7	10.8

式中 R 为曲率半径，y 是至沟道中心的距离．这就是说，粒子经历了一个修正的连续势．粒子的平衡位置从沟道中心移向一边．因此，“弯曲”使临界角减小了．当弯曲到达一定程度时沟道的粒子完全退道．汀葛罗夫估计弯曲的临界半径为

$$R_T = \frac{E}{eE_c} \tag{6.6-5}$$

式中 E 为粒子的总能量，E_c 是离晶格平面一定距离处的原子电场强度．这就是说，在这个位置时粒子的轨迹由于它同单个原子相互作用而不再是稳定的．表 6.6-2 给出 100 吉电子伏/c 粒子对 Si、Ge 和 W 晶体的沟道性质．8.4 吉电子伏/c 粒子对 Si(111) 平面沟道的临界角约 45 微弧度，临界半径 $R_T = 2$ 厘米，这种临界半径与一相对论粒子在曲率半径为 $R = \dfrac{P}{0.03B}$ 的磁场中运动相对应，其中 $E \simeq P$ (吉电子伏/c)，B(KG) 单位千高斯是磁场强度，R 为磁场中的曲率半径．这样，钨中 (110) 面沟道的等效磁场是 160 千高斯．

图 6.6-16 是 8.4 吉电子伏/c 沟道粒子通过各种不同弯曲角度的硅单晶 (110) 面后，得到的出射粒子角分布．弯曲角度一直增大到 26 毫弧度，在弯曲区域的退道率没有明显变化．根据图

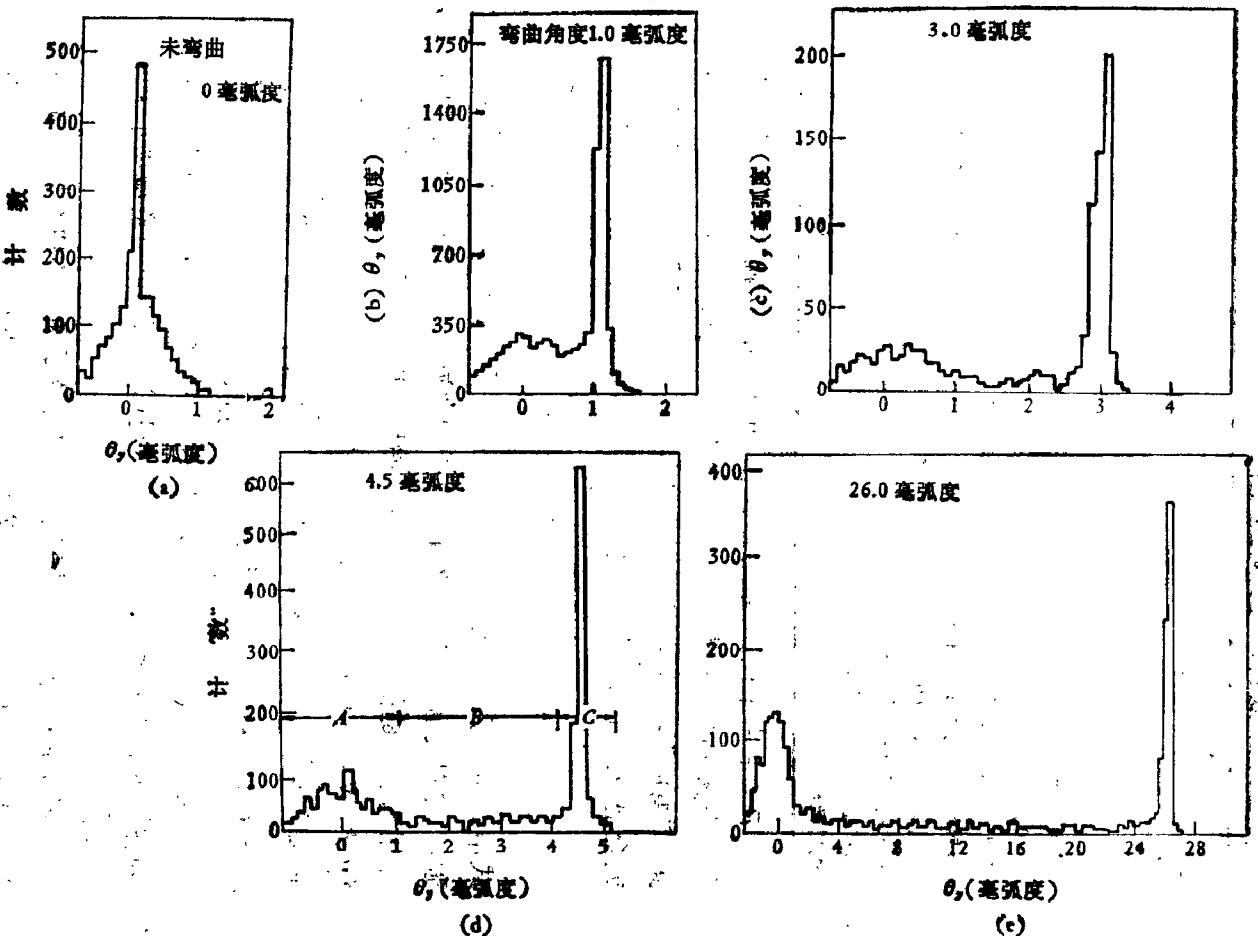


图 6.6-16 沟道粒子通过各种弯曲角度的晶体 Si(111) 后在垂直平面中的出射角分布[97].

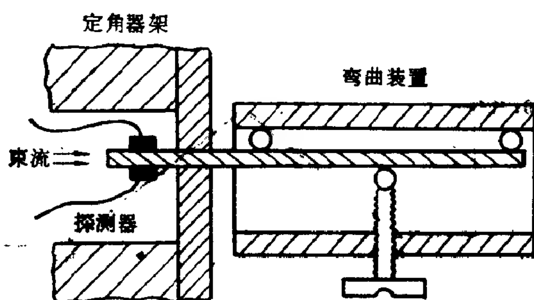


图 6.6-17　从上面看到的弯曲装置图(未按比例)

5.4-4，可以把图 6.6-16 中各出射粒子角分布曲线可分成三部分：(i) 直射的前峰是由未偏转或偏转很小的粒子的贡献；(ii) 在曲率不变晶体弯曲部分粒子的退道的贡献；(iii) 透射部分，粒子一直通过晶体弯曲部分的曲平面沟道从端点射出的贡献. 仔细研究弯曲对退道的影响表明，沟道粒子从平直区域走到弯曲区域，由于可能存在的位错和势阱的变化（图 6.6-15）而损失特别多. 一旦沟道粒子进入曲率不变的弯曲区域，退道仅由正常的多重散射引起的，这部分随着晶体弯曲角度的增加变化不大[50]. (iii) 是完全为弯曲晶体的沟道所导向到弯曲角度的部分，当然也包括少数原来是大于临界角入射的粒子因多重散射跑到沟道中来（图 6.6-12 所示). 这部分在晶体弯曲角度为 26 毫弧度时占入射沟道粒子 20.3%.

进一步用能量更高的入射粒子或较薄的晶体研究晶体弯曲对退道的影响. 当用图 6.6-17 所示的三点弯曲装置弹性弯曲晶体时，由于沿晶片弯曲部分的曲率分布变成如图6.6-18(a) 所示的形状，于是，在 60 吉电子伏粒子沿 Si(111) 方向入射所得到的出射粒子角分布中，除了向前方向(未弯曲部分)和完全偏转方向(即通过整个晶体的弯曲沟道) 各有一个类似于图 6.6-16 所示的峰外，在未偏转峰和完全偏转峰之间大约一半处还有一个突出的峰，如图 6.6-18(b) 所示. 弄清这种出射谱中各峰产生的原因和强度以

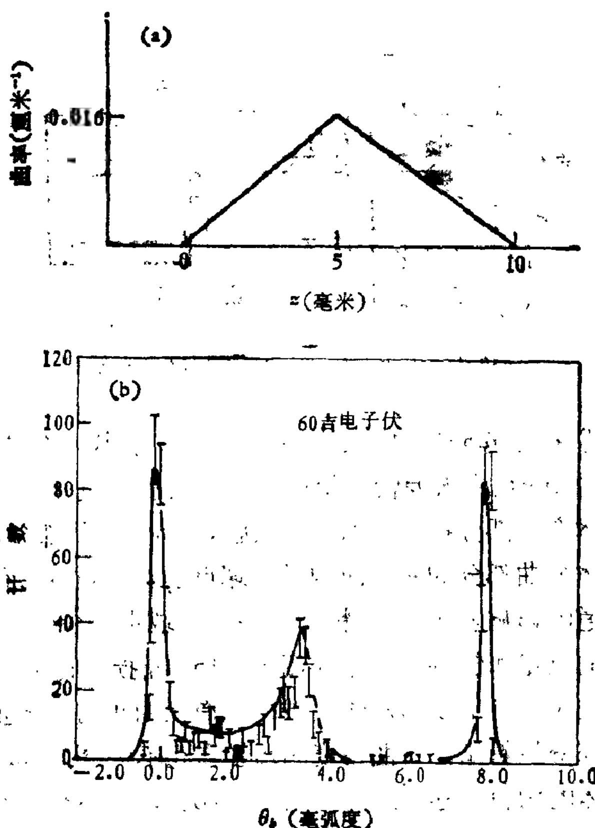


图 6.6-18 (a) 三点弯曲装置使晶片弯曲部分的曲率分布.
(b) 60 吉电子伏带电粒子流在这种弯曲晶体 Si(111) 面入射时得到的出射粒子角分布[39]

及峰之间的出射粒子强度不仅在实际应用上有重要的意义，而且对理解粒子在弹性变形晶体中的基本退道过程也有价值。根据图 6.6-18(a)所示的曲率分布，晶体弯曲产生的退道应在弯曲装置头两点之间，而在曲率不变或减小时则不会产生由离心力作用引起的退道[图 6.6-18(b)].中间峰产生的主要原因是由弯曲中点周围曲率的变化.如果采用弹性形变理论计算局部曲率，那么有可能利用这种效应作"退道谱仪"把观察到的退道同连续势模型计算结果进行比较[40]。图 6.6-19 是沟道粒子在 Si(111) 面(弹性弯曲)

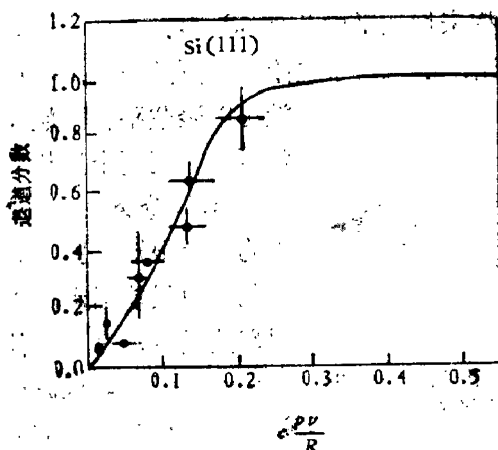


图 6.6-19 沟道粒在弯曲的 Si(111) 面退道几率同 $\frac{Pv}{R}$ 的关系，实线为理论计算值，点为实验结果[59]

退道几率同 $\frac{Pv}{R}$ 函数关系的实验测量与理论计算．两者符合得相当好．这说明连续模型的计算来求通过弯曲晶体的透射是较为合理的，而"汀葛罗夫半径" R_T [(6.6-5) 式]过高地估计了粒子的透射几率，因为在艾利森 (Ellison)[60] 的计算中沟道粒子靠近原子平面"墙"的临界距离采用了托马斯-费米屏蔽距离．

五　可能的应用

除了 § 6.5 中已经谈到的用阻塞效应测量基本粒子寿命外，弯曲晶体导向高能带电粒子在科学技术，特别是高能实验物理上有相当的应用前景．

(i) 引出束．弯曲晶体可以提供基本上没有厚度的挡板以把粒子从加速器偏转引出．晶体所能弯曲到的角度已经足够了．关键是要把临界角内的角接收同引出发射相配合，空间接收角是满意的．这种晶体挡板的退道损失和磁偏转损失差不多．

(ii) 二次束的偏转．利用弯曲晶体的沟道效应可把靶产生的二次束流偏转到实验的管道线上．在接近产生二次束的靶处，可

以利用叠层结构来增加平面几何的厚度.

(iii) 束流聚焦. 如果把晶体弯曲成如图 6.6-20 所示的形状,就可以聚焦平行的粒子束. 二维聚焦可以采用两个这样的单元.

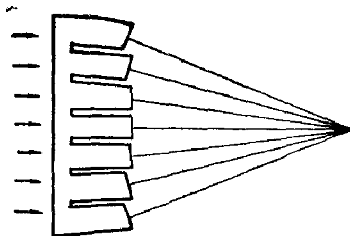


图6.6-20 用片式或压缩单晶产生微分束来制造聚焦单元

(iv) 分离短寿命的粒子. 粲粒子的寿命很短,既使在能量很高的情况下也只能运动不到 1 厘米. 利用弯曲晶体,有可能使粲粒子偏转几百个微弧度,远离产生粒子束的前锥,如果在同一沟道中的其它长寿命粒子继续沿沟道前进,那么可以得到集聚的粲粒子样品(如图 6.6-21),平面几何角接收度是产生锥的 1%,高能粲粒子的产生是相当丰富的,重要的问题是如何将它们分离出来.

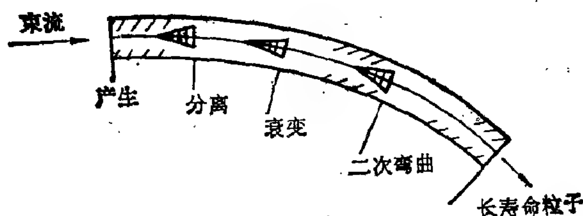


图 6.6-21 分离粲粒子束. 所有在临界角内的粒子均偏转,粲粒子在垂直区域衰变,长寿命粒子继续沿着弯曲晶体向前走

(v) 粲粒子磁矩的测量. 晶体的电场可转换成在运动粒子静止坐标系中的一个磁场. 粒子的自旋将绕着磁矢量进动. 这对奇异粒子已经做到了. 弯曲晶体的有效电场足以使磁矩在 1 厘米内进动几个弧度.

正是由于这些原因,这个领域的科学研究,是当前沟道效应一个相当活跃的前沿.

参 考 文 献

[1] B. R. Appleton and G. Foti, "Ion Beam Handbook for Material Analysis" (eds: J. W. Mayer and E. Rimini) Academic Press, New York (1977).

[2] C. S. Barret, R. M. Mueller, and W. White, *J. Appl. Phys.*, **39**, 4694(1968).
[3] J. A. Davies, Material Characterization Using Ion Beams, (eds: J. P. Thomas and A. Cachard), Plenum Press, New York, p. 405(1978).
[4] J. K. Lindhard, Dan. Vidensk. Selsk. *Mat.-Fys. Medd.*, **34**, No. 14(1965).
[5] E. Bøgh and J. L. Whitton, *Phys. Rev. Letters*, **19**, 553(1967).
[6] R. B. Alexander, and J. M. Poate, *Proc. Gausdal Conf. on Atomic Collisions in Solids, Rad. Effects*, **12**, 211(1972).
[7] S. T. Picraux, W. L. Brown, and W. M. Gibson, *Phys. Rev.*, **B6**, 1382(1972).
[8] 王广厚，物理学报，**33**，53(1984).
[9] S. T. Picraux and F. L. Vook, "Ion Implantation in Semiconductors" (ed., S. Namba), Plenum, New York, p. 355(1975).
[10] G. Della Mea, A. V. Drigo, S. Lo Russo, P. Mazzoldi, S. Yamaguchi, G. G. Bentini, A. De Salvo, and R. Rosa, *Phys. Rev.*, **B10**, 1836(1974).
[11] J. R. MacDonald, R. A. Boie, W. Darcey, and R. Hensler, *Phys. Rev.*, **B12**, 1633(1975).
[12] A. P. Pathak, *Rad. Eff.*, **61**, 1(1982).
[13] L. C. Feldman, J. W. Mayer and S. T. Picraux Material Analysis by Ion Channeling, Academic Press, New York (1982).
[14] G. H. Wang (王广厚), P. J. Cong (丛培杰), W. M. Gibson, C. R. Sun, I. J. Kim, S. Salman, M. Pisharody, S. I. Baker, R. A. Carrigan, Jr., J. S. Forstor and I. V. Mitchell, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research*, **218**, 669(1983).
[15] 王广厚，弯曲晶体中辐射缺陷的分离现象，第五次全国核物理会议论文报告，四川成都(1982 年 10 月).
[16] D. A. Thompson, A. Golanski, H. K. Haugen, D. V. Stevenovic, G. Carter and C. E. Christodoulides, *Rad. Eff.*, **52**, 69(1980).
[17] P. Baeri, S. U. Campisano, G. Ciavola and E. Rimini, *Nucl. Instr. Meth.*, **132**, 237(1976).
[18] Y. Quèré, *Phys. Status Solidi*, **30**, 713(1968).
[19] S. T. Picraux, E. Rimini, G. Foti and S. U. Campisano, *Phys. Rev.*, **B18**, 2078 (1978).
[20] G. Foti, S. T. Picraux, S. U. Campisano, E. Rimini and R. A. Kant: "Dechanneling by dislocation in Zn-implanted Al"; 5th Int. Conf. Ion Implantation in Semiconductors and Other Materials, Plenum Press, N. Y. (1977).
[21] J. A. Ellison and S. T. Picraux, *Phys. Lett.*, **83A**, 271(1981).
[22] H. Kudo, *Phys. Rev.*, **B18**, 5995(1978).
[23] M. L. Swanson, L. M. Howe, T. E. Jackman and J. A. Moore, *Nucl. Instr. and Meth.*, **194**, 165(1982).
[24] C. R. Sun, W. M. Gibson, I. J. Kim, G. H. Wang, N. K. Bulgakov, N. A. Filatova, A. Forycki, V. M. Golovatyuk, Z. Guzik, R. B. Kadyrov, T. S. Nigmanov, V. D. Riabtsov, A. B. Sadovsky, M. D. Shafranov, I. A. Tyapkin, E. N. Tsyganov, A. S. Vodopianov, J. Wojtkowska, N. I. Zimin, R. A. Carrigan, Jr., T. E. Toohig and M. D. Bavizhev, *Nucl. Instr. and Meth. in Physics Research*, **B2**, 60(1984).

[25] S. U. Campisano, G. Foti and M. Servidori, *Appl. Phys. Lett.*, **36**, 279(1980).
[26] G. Foti, L. Csepregi, E. F. Kennedy, P. P. Pronko and J. W. Mayer, *Phys. Lett.*, **64A**, 265(1977).
[27] L. C. Feldman, R. L. Kauffmann, P. J. Silverman, R. A. Zuhr, J. H. Barrett, *Phys. Rev. Lett.*, **39**, 38(1977).
[28] J. H. Barrett, *Phys. Rev.*, **B3**, 1527(1971).
[29] I. Stensgaard, L. C. Feldman and P. J. Silverman, *Surf. Sci.*, **77**, 513(1978).
[30] L. C. Feldman, *Nucl. Instr. and Meth.*, **191**, 211(1981).
[31] L. C. Feldman, P. J. Silverman and I. Stensgaard, *Surf. Sci.*, **87**, 410(1979).
[32] L. C. Feldman, P. J. Silverman and I. Stensgaard, *Nucl. Instr. Meth.*, **168**, 589(1980).
[33] I. Stensgaard, L. C. Feldman and P. J. Silverman, *Surf. Sci.*, **102**, 1(1981).
[34] R. M. Tromp, R. G. Smeenk and F. W. Saris, *Phys. Rev. Lett.*, **46**, 939(1981).
[35] J. A. Davies, T. E. Jackson, D. P. Jackson and P. R. Norton, *Surf. Sci.*, **109**, 20(1981).
[36] R. J. Culbertson, L. C. Feldman and P. J. Silverman, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 2043(1980).
[37] R. J. Culbertson, L. C. Feldman, P. J. Silverman and H. Boehm, *Phys. Rev. Lett.*, **47**, 657(1981).
[38] J. F. Van der Veen, R. G. Smeenk, R. H. Tromp and F. W. Saris, *Surf.Sci.*, **82**, 468(1979).
[39] N. W. Cheung, R. J. Culbertson, L. C. Feldman, P. J. Silverman, K. W. West and J. W. Mayer, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 120(1980).
[40] W. M. Gibson and K. O. Nielsen, *Phys. Rev. Lett.*, **24**, 114(1970).
[41] W. C. Turkenburg, et al., *Nucl. Instr. Meth.*, **132**, 587(1976).
[42] J. U. Andersen, A. S. Jensen, K. Jørgensen, E. Laegsgaard, K. O. Nielsen, J. S. Foster, I. V. Mitchell, D. Ward, W. M. Gibson and J. J. Cuomo, K. Dan. Vid. Sel. *Mat. Fys. Medd.*, **40**, No. 7(1980).
[43] R. P. Sharma, J. U. Andersen and K. O. Neilsen, *Nucl. Phys.*, **A204**, 371(1973).
[44] J. U. Andersen, J. M. Forster, W. M. Gibson, E. Laegsgaard, I. Mitchell and K. O. Neilsen, *Nucl. Phys.*, **A241**, 317(1975).
[45] В. В. Каманин, С. А. Карамян, Ф. НормУратов, С. Л. Третьякова, *Ядерная Физика*, **16**, 447(1972).
[46] 孙相府、潘家佑、袁双贵、徐国俊，原子核物理，**1**，93(1979).
[47] W. M. Gibson, *Ann. Rev. Nucl. Sci.*, **25**, 465(1975).
[48] F. Brown, D. A. Marsden and R. D. Werner, *Phys. Rev. Lett.*, **20**, 1449(1968).
[49] G. M. Temmer, 5th. Symposium on Low and Medium Mass Nuclei, University of Kentucky, Oct. 26—28, University of Kentucky, Press (1972).
[50] R. J. Glauber, High Energy Physics and Nuclear Structure (ed, S. Devons), Plenum Press? New York p. 209(1970).
[51] "Review of Particle Properties", *Rev. Mod. Phys.*, 48(1976).
[52] C. R. Sun, W. M. Gibson, J. A. Golovchenko, J. K. Kim, S. Salman, G. H. Wang (王广厚), G. O. Williams, R. Wong, J. U. Andersen, J. Bale, J. Fostar,

S. P. Mollier, H. Nielsen, G. Peterson and E. Uggerhoj, BNL Experimental Proposal (1981).

[53] H. Esbensen, O. Fich, J. A. Golovchenko, K. O. Nielsen, E. Uggerhøj and C. Vraast-thomsen, *Nucl. Phys.*, **B127**, 281(1977).

[54] 王广厚，第二届高能实验物理讨论会文集，北京，p. 92-1(1983).

[55] S. K. Andersen, O. Fich, H. Nielsen, H. E. Schiøtt, E. Uggerhøj and C. Vraast Thomsen, *Nucl. Phys.*, **B167**, 1(1980).

[56] E. N. Tsyganov, Fermilab TM-682, TM-684, Batavia (1976).

[57] A. F. Elishev, N. A. Filatova, V. M. Golovatyuk, I. M. Ivancheauo, R. B Kadyrov, N. N. Karpenko, V. V. Korenkov, T. S. Nigmanov, V. D. Riabtsov, M. D. Shafranov, B. Sitar, A. E. Senner, B. M. Starchenko, V. A. Sutulin, I. A. Tyapkin, E. N. Tsyganov, D. V. Uralsky, A. S. Vodopianov, A. Forycki, Z. Guzik, J. Wojtkowska, R. Zelazny, I. A. Grishaev, C. D. Kovalenko, B. I. Shramenko, M. D. Bavizhev, N. K. Bulgakov, V. V. Adeichikov, R. A. Carrigan Jr., T. E. Toohig, W. M. Gibson, Ick-Joh Kim, J. Phelips and C. R. Sun, *Phys. Lett.*, **88B**, 387(1979).

[58] S. I. Baker, R. A. Carrigan Jr., C. Crawford, T. E. Toohig, W. M. Gibson, H. Jin, I.-J. Kim, M. Pisharody, S. Salman, C. R. Sun, G. H. Wang (王广厚), R. Wijayawardana, J. S. Foster, H. Hatton, I. V. Mitchell, Z. Guzik, T. S. Nigmanov, E. N. Tsyganov, V. V. Avdeichikov, J. A. Ellison and P. Siffert, *Phys. Lett.*, **137B**, 129(1984).

[59] W. M. Gibson, I. J. Kim, M. Pisharody, S. Salman, C. R. Sun, G. H. Wang (王广厚), R. Wijayawardana, J. S. Forster, I. V. Mitchell, T. S. Nigmanov, E. N. Tsyganov, S. I. Baker, R. A. Carrigan, Jr., T. E. Toohig, V. V. Avdeichikov, J. A. Ellison and P. Siffert, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Research*, **B2**, 54(1984).

[60] J. A. Ellison and S. T. Picraux, *Phys. Lett.*, **83A**, 271(1981); J. A. Ellison, *Nucl. Phys.*, **B206**, 205(1982).

1.1

1.2

1.3

——

2.1

-

2.2

2.3

2.4

2.5

2.6 □□□□

□ □□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□

2.7 □□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□

□ □□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□□

□□□ □□□□□□□□□□□□□□□

3.1 □□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□□

□ □□□□

□ □□□□□——□□□□

3.2 □□□□□□□□

□ □□□□

□ □□□□(θ1=0□□□□□)

□ □□□□□□

□ □□□□□□□

3.3 □□□□□□□□□□

□ □□□

□ □□□□□□

□ □□□□

□ □□□□□□□□□□□□□

3.4 □□□□□□

□ □“□□”(□□□□)□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□□

□ □□□□

□ □□□□

□ □□□□□□□□

3.5 □□□□□□

□ □□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□

□ □□□□□□□□□

3.6 □□□□X□□□□(PIXE)

7.1

7.2

7.3

7.4

7.5

7.6

MDS

7.7

□ □□□□□□

□ □□□□□□□□□□□□□□□□□□□
□□□(GaAs)□□

7.8 □□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□

7.9 □□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□Tc□□□

□ □□□□□□□□□□□□□□□□□□□

7.10 □□□□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□

□ □□□□□□□——N+□c+□□□

□ □□□□□

□ □□□□□□□□——□□□□

□□ □□□□□□□

□□□□

□□□ □□□□

8.1 □□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□

□ □□□□□□□□□

□ □□□□□WSS□□

□ □□□□□□□

□ “□□”□□□□□□□□□□□“□□□”

□ □□□□□□□□□

□ □□□□□□□

8.2 □□□□□□□□

□ □□□□□□□□□

□ □□□

□ □□□□

□ □□□□□

8.3 □□□□□□□□

□ □□□□□□□□□□□□□

10.5